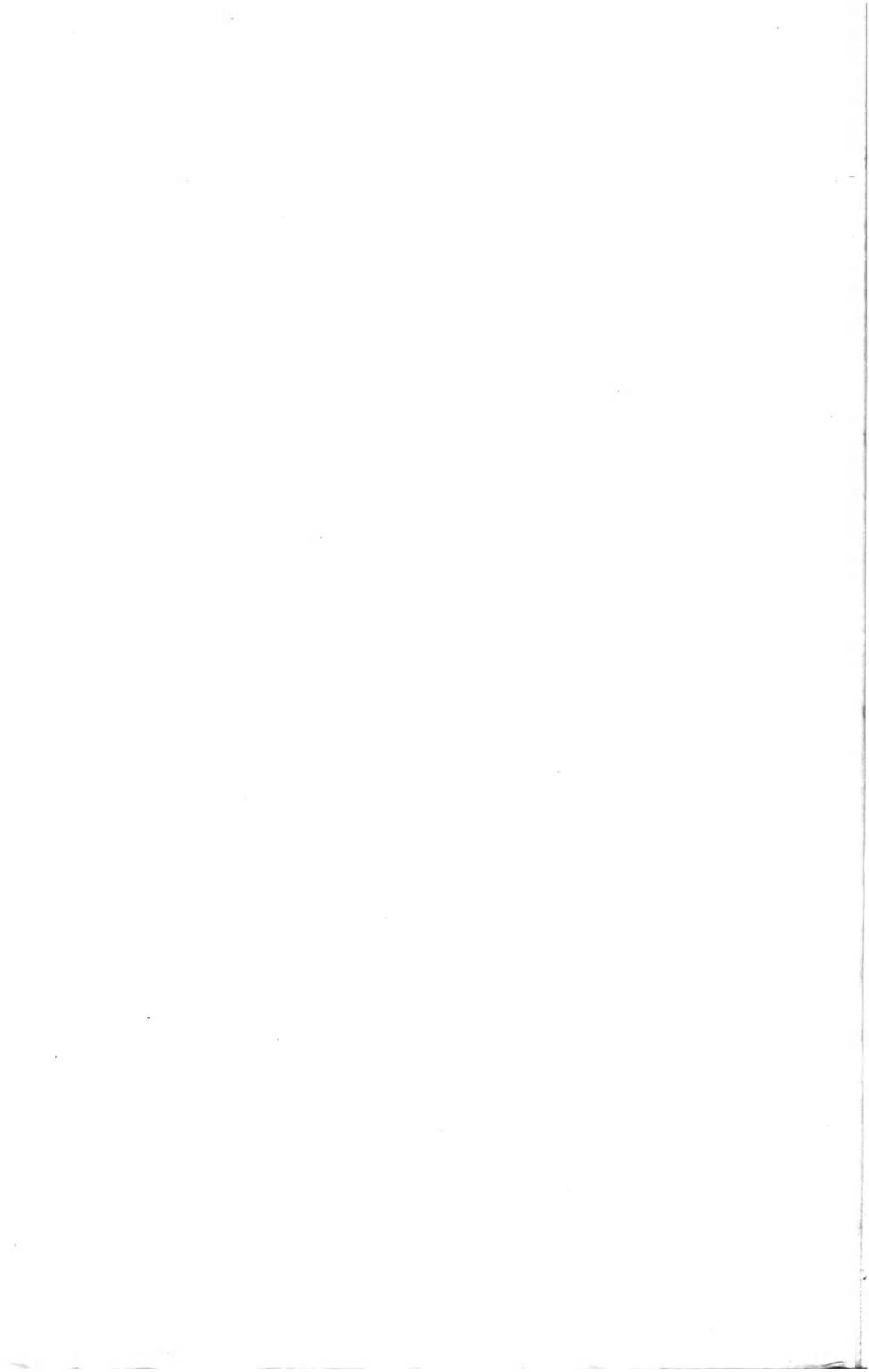


Ч.Пул

# Справочное руководство по физике

Издательство «Мир»



# Справочное руководство по физике

---

# THE PHYSICS HANDBOOK

## Fundamentals and Key Equations

by CHARLES P. POOLE, Jr

Department of Physics and Astronomy  
University of South Carolina

---



A Wiley-Interscience Publication  
JOHN WILEY & SONS, INC.

New York • Chichester • Weinheim • Brisbane • Singapore • Toronto

**Ч. ПУЛ**

---

# СПРАВОЧНОЕ РУКОВОДСТВО по ФИЗИКЕ

Фундаментальные концепции,  
основные уравнения  
и формулы

---

Перевод с английского  
канд. физ.-мат. наук М. В. Фоминой,  
канд. физ.-мат. наук А. В. Хачояна,  
канд. физ.-мат. наук Д. Е. Лейкина  
и А. Н. Куксенко  
под редакцией  
д-ра физ.-мат. наук  
Е. М. Лейкина



Москва «Мир» 2001

УДК 53  
ББК 22.3  
П88

Ч. Пул

П88 Справочное руководство по физике. Фундаментальные концепции, основные уравнения и формулы: Пер. с англ. — М.: Мир, 2001. — 461 с., ил.

ISBN 5-03-003330-0

Книга содержит сжатое изложение основных концепций, уравнения и формулы современной физической науки. Справочник включает основы механики, теории относительности, термодинамики, статистической физики, электродинамики, оптики, квантовой механики, физики атома, физики конденсированных сред, физики атомного ядра и элементарных частиц, а также ряд разделов математической физики.

Для широкого круга лиц, изучающих и преподающих физику в университетах и вузах физико-технического профиля, а также специалистов, практическая работа которых связана с приложениями физики.

ББК 22.3

*Редакция литературы по физике и астрономии*

ISBN 5-03-003330-0 (рус.)  
ISBN 0-471-18173-0 (англ.)

© 1998 by John Wiley and Sons,  
Inc. All rights reserved.  
Authorized translation from the  
English language edition  
published by John Wiley & Sons,  
Inc.  
© перевод на русский язык,  
«Мир», 2001

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

---

Как отмечает автор в своем предисловии, идея собрать в одном томе материал, который достаточно полно отражал бы современное содержание физической науки, потребовала для своей реализации два десятилетия. При этом важную роль играло то обстоятельство, что содержание руководства все это время пополнялось и совершенствовалось в процессе чтения автором двухгодичного курса физики и живого общения со слушательской аудиторией. Программа курса была рассчитана на подготовку к сдаче квалификационных экзаменов, сходных с экзаменами кандидатского минимума в России. Она охватывает основные разделы физики от классической механики до субъядерной физики при сохранении на достаточно высоком уровне общепринятой последовательности изложения материала.

Поскольку книга представляет собой справочное руководство, ее содержание ограничивается сжатым изложением основных фундаментальных концепций, а также сводкой формул и уравнений. Благодаря этому она может оказаться полезной весьма широкому кругу лиц, изучающих физику в университетах и вузах физико-технического профиля, многочисленным преподавателям физики различного уровня, и, наконец, специалистам, соприкасающимся с этой областью науки в своей практической деятельности.

Поставив перед собой уникальную задачу — изложить в одном томе основные результаты современной физики — автор неизбежно оказался перед проблемой отбора материала, решение которой далеко не однозначно и в определенной степени отражает круг его профессиональных интересов. Совершенно очевидно, что единственный том справочного руководства не в состоянии вместить всей физики. Однако отсутствие всеобъемлющего охвата данных не должно помешать данному руководству стать настольной книгой широкого круга читателей. Проблемы, оказавшиеся за пределами

книги Ч. Пула, читатель без труда найдет в неоднократно переизданной многотомной монографии, носящей поистине энциклопедический характер и известной во всем мире как Курс теоретической физики под общей редакцией академика Л. Д. Ландау. Содержание последнего издания приведено ниже. Что касается проблем математической физики, встречающихся при рассмотрении физических задач, то читатель может обратиться к многотомной Справочной математической библиотеке (СМБ).

При переводе мы стремились сохранить в различных разделах единую терминологию, по возможности совпадающую с общепринятой в отечественной научной литературе, а также исправить неточности и опечатки оригинала.

Перевод книги выполнен кандидатом физ.-мат. наук М. В. Фоминой — гл. 1–5, кандидатом физ.-мат. наук А. В. Хачояном — гл. 6–9, 15, 16, 25–28, кандидатом физ.-мат. наук Д. Е. Лейкиным — гл. 10–12, 19, 20, 24. Главы 13, 14, 17, 18, 21–23 переведены безвременно ушедшей из жизни А. Н. Куксенко.

Е. М. Лейкин

1. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. I. Механика. — М.: Наука, 1988. (4-е издание, исправленное)
2. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. II. Теория поля. — М.: Наука, 1988. (7-е издание, исправленное)
3. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1974. (3-е издание, переработанное и дополненное)
4. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. IV. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Квантовая электродинамика. — М.: Наука, 1980. (2-е издание, переработанное)
5. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. — М.: Наука, 1976. (3-е издание, дополненное)
6. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. — М.: Наука, 1986. (3-е издание)
7. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. — М.: Наука, 1987. (4-е издание, исправленное и дополненное)
8. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. (2-е издание, переработанное и дополненное)
9. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. IX. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. — М.: Наука, 1978.
10. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Т. X. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.

## ПРЕДИСЛОВИЕ

---

Эта книга представляет собой попытку создать краткое руководство по физике для студентов старших курсов. Она содержит сжатое изложение материала, часто необходимого специалисту в процессе его преподавательской или исследовательской деятельности.

Большинство глав включает разделы, которые студенты старших курсов и соискатели ученой степени должны усвоить при подготовке к сдаче квалификационного экзамена. Первоначально в основу рукописи были положены записи, накопленные автором в течение двадцати лет преподавания на квалифицированных подготовительных курсах. За эти годы студентами было задано множество вопросов и сделаны многочисленные комментарии по содержанию лекций, что существенно помогало мне в работе над книгой. Обучение каждого студента курса занимало два семестра и это позволяло последовательно, шаг за шагом уяснить точку зрения студента на материал каждой главы. Я глубоко признателен всем моим ученикам за их способность проникать в сущность предмета.

Главный аспект книги как справочного руководства возник в результате того, что я не терял из своего поля зрения разнообразные вопросы, ответы на которые я отыскивал в литературе на протяжении всей моей сорокалетней деятельности специалиста и преподавателя физики. Некоторая информация бывает нужна часто — это алгебра матриц, векторные тождества, специальные функции типа полиномов Лежандра; все это можно найти в двух последних главах книги. Другие вопросы возникают в работе от случая к случаю, например, разъяснение концепций лагранжианов, проблема четности, дисперсионные соотношения, хаос, свободные энергии, статистические ансамбли и классификация элементарных частиц, и этот материал распределен по остальным главам.

Эта книга должна быть полезна своим изначальным предназначением, а именно сжатым изложением содержания физики для подготовки к квалификационному экзамену. Но еще большее значение она, без сомнения, должна иметь для специалистов, которые смогут по достоинству оценить это краткое руководство, содержащее фундаментальные концепции и ключевые уравнения. В работе специалисту довольно часто бывает необходимо освежить в памяти принципиальные вопросы теории и практики, которые были изучены еще в студенческие годы, и данная книга призвана способствовать этому. Я надеюсь, что она в равной степени окажется полезна как студентам, так и специалистам.

Мне доставило глубокое удовлетворение сразу же после выхода в отставку посвятить себя работе над тем, чтобы в одной книге собрать все то, что я изучал еще будучи студентом, в Фордхэме и в университете штата Мэриленд в 1950-е годы, а именно, классическую механику, электродинамику, квантовую механику наряду с более современными разделами, необходимыми, скажем, для решения в явном виде задачи трех тел, изучения элементарных частиц и хаоса. Ряд важных разделов, включая многочисленные полезные функции и таблицы формул, представленные в двух заключительных главах, были добавлены по рекомендации рецензентов, которым я искренне благодарен. Хочу также поблагодарить моего сына Майкла за многочисленные рисунки, сделанные им для книги.

# ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ

---

## 1. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ

**Постоянная Авогадро**  $N_A = 6,0221 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>

**Постоянная Больцмана**  $k_B = R/N_A = 1,3807 \cdot 10^{23}$  Дж/К

**Электрическая постоянная**  $\epsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12}$  Ф/м

**Заряд электрона**  $e = 1,60218 \cdot 10^{-19}$  Кл

**Постоянная тонкой структуры**  $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 7,2974 \cdot 10^{-3}$   
 $\alpha^{-1} \sim 137$

**Универсальная газовая постоянная**  $R = N_A k_B = 8,3145$  Дж/моль·К

**Гравитационная постоянная**  $G = 6,6726 \cdot 10^{-11}$  Н·м<sup>2</sup>/кг<sup>2</sup>

**Скорость света в вакууме**  $c = 2,9979 \cdot 10^8$  м/с

**Нормальный молярный объем** ( $T_0 = 273,15$  К,  $P_0 = 10^5$  Па)  $V_m = RT_0/P_0 = 2,2711 \cdot 10^{-2}$  м<sup>3</sup>/моль

**Магнитная постоянная**  $\mu^0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Н/А<sup>2</sup> =  $1,25664 \cdot 10^{-6}$  Н/А<sup>2</sup>

**Постоянная Планка**  $h = 6,6261 \cdot 10^{-34}$  Дж·с

**Приведенная постоянная Планка**  $\hbar = h/2\pi = 1,0546 \cdot 10^{-34}$  Дж·с

**Квант вращения**  $h/m_e = 7,2739 \cdot 10^{-4}$  м<sup>2</sup>/с

**Энергия Ридберга (атом водорода)**  $e^2/8\pi\epsilon_0 a_0 = 2,17987 \cdot 10^{-18}$  Дж (13,606 эВ)

**Постоянная Стефана—Больцмана**  $\sigma = 5,6705 \cdot 10^{-8}$  Вт/м<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>

**Постоянная закона смещения Вина**  $b = \lambda_{\max} T = 2,8978 \cdot 10^{-3}$  м·К

## 2. ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ

Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2m_e =$ $= 9,27402 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл
Ядерный магнетон	$\mu_N = 5,0508 \cdot 10^{-27}$ Дж/Тл
Постоянная Фарадея	$F = N_A \cdot e =$ 96485 Кл/моль
Квант магнитного потока	$\Phi_0 = h/2e = 2,0678 \cdot 10^{-15}$ Вб
$g$ -фактор, электрон	$g_e = 2,00232$
Постоянная Холла	$R_H = h/e^2 = 25,813$ Ом
Частота Джозефсона	$\omega_J = 2\pi(2eV/h)$ ( $10^{-6}B = 483,60 \cdot 10^6$ Гц)

## 3. ПЕРЕВОДНЫЕ МНОЖИТЕЛИ

**Энергия:** 1 эВ =  $1,6022 \cdot 10^{-19}$  Дж =  $1,7827 \cdot 10^{-36}$  кг =  $2,4180 \times 10^{14}$  Гц = 8065,5 см<sup>-1</sup> =  $1,0735 \cdot 10^{-9}$  а.е.м. =  $1,1604 \cdot 10^4$  К

**Температура:** 1 К =  $1,3807 \cdot 10^{-23}$  Дж =  $1,5362 \cdot 10^{-40}$  кг =  $2,0837 \cdot 10^{10}$  Гц = 0,69504 см<sup>-1</sup> =  $9,2511 \cdot 10^{-14}$  а.е.м. =  $8,6174 \cdot 10^{-5}$  эВ

**Длина:** 1 м = 100 см =  $10^{10}$  Å; длина марафонской дистанции = 42,195 км

**Магнитное поле:** 1 Тл = 1 Вб/м<sup>2</sup> =  $10^4$  Гс

**Давление:** 1 ГПа = 10 кбар =  $7,5 \cdot 10^6$  торр =  $0,987 \cdot 10^4$  атм.

**Дольные множители:** м (милли,  $10^{-3}$ ); мк (микро,  $10^{-6}$ ); н (нано,  $10^{-9}$ ); п (пико,  $10^{-12}$ ); ф (фемто,  $10^{-15}$ ); а (атто,  $10^{-18}$ ); з (зепто,  $10^{-21}$ ); у (йокто,  $10^{-24}$ )

**Кратные множители:** к (кило,  $10^3$ ); М (мега,  $10^6$ ); Г (гига,  $10^9$ ); Т (тера,  $10^{12}$ ); П (пета,  $10^{15}$ ); Э (экса,  $10^{18}$ ); З (зетта,  $10^{21}$ );  $Y$  (йотта,  $10^{24}$ )

## 4. ХАРАКТЕРНЫЕ ДЛИНЫ

**Планковская длина**  $l_p = (\hbar G/c^3)^{1/2} = 1,6161 \cdot 10^{-35}$  м

**Классический радиус**  $r_e = \alpha^2 a_0 = e^2/4\pi\epsilon_0 m_e c^2 =$   
электрона  $= 2,8179 \cdot 10^{-15}$  м

**Сечение томсоновского**  $\sigma = (8\pi/3)r_e^2 = 6,6525 \cdot 10^{-29}$  м<sup>2</sup>  
рассеяния

Комптоновская длина волны (электрон)	$\lambda_c = h/m_e c = 2,4263 \cdot 10^{-12}$ м
Боровский радиус	$a_0 = r_e/\alpha^2 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 = 5,2918 \cdot 10^{-11}$ м
Радиус Солнца	$R_s = 6,96 \cdot 10^8$ м
Расстояние от Земли до Солнца (астрономическая единица)	$R_{es} = 1,496 \cdot 10^{11}$ м
Световой год	$1 \text{ св.год} = 9,4607 \cdot 10^{15}$ м
Расстояние до ближайшей звезды	$4,1 \cdot 10^{16}$ м
Расстояние до центра Галактики	$\sim 3 \cdot 10^{20}$ м
Расстояние до Туманности Андромеды	$2,1 \cdot 10^{22}$ м
Приблизительный радиус Вселенной	$\sim 10^{26}$ м

## 5. ХАРАКТЕРНЫЕ ИНТЕРВАЛЫ ВРЕМЕНИ

Планковское время	$t_p = (\hbar G/c^3)^{1/2} = 5,3906 \cdot 10^{-44}$ с
Характерное время сильного взаимодействия	$\sim 10^{-23}$ с
Характерное время электромагнитных взаимодействий	$\sim 10^{-19}$ с
Характерное время слабого взаимодействия	$\sim 10^{-11}$ с
Время, за которое свет проходит расстояние от Солнца до Земли	499 с
Время полного оборота Земли вокруг Солнца (1 год)	$3,1557 \cdot 10^7$ с
Время прохождения света до ближайшей звезды	$1,4 \cdot 10^8$ с
Время прохождения света до Туманности Андромеды	$7 \cdot 10^{13}$ с
Возраст Вселенной	$\sim 10^{17}$ с

## 6. СВОЙСТВА ЧАСТИЦ

Частица	Масса ( $\times 10^{-31}$ кг)	Энергия покоя ( $\times 10^{-13}$ Дж)	Энергия покоя (Мэв)	Магнитный момент ( $\times 10^{-26}$ Дж/Тл)
Электрон	9,10939	0,81871	0,51100	928,48
Мюон	1883,53	169,29	105,66	4,4905
Протон	16726,2	1503,3	938,27	1,4106
Нейтрон	16749,3	1505,4	939,57	0,99624
Дейtron	33435,9	3005,0	1875,6	0,43307
Атомная единица массы (1/12 массы изотопа $^{12}\text{C}$ )	16605,4	1492,4	931,494	—

# ГЛАВА 1

---

## УРАВНЕНИЯ ЛАГРАНЖА И ГАМИЛЬТОНА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе будет рассмотрено несколько подходов к проблемам динамики в классической механике, т. е. к проблемам движения под действием сил. Мы изложим подходы, основанные на учете действующих сил и энергий, обсудим уравнения Лагранжа и Гамильтона, и, наконец, рассмотрим некоторые вариационные методы. Будут приведены явные выражения лагранжианов, гамильтонианов и канонических переменных для ряда известных систем.

### 2. ПОДХОД, ОСНОВАННЫЙ НА ЗАКОНЕ НЬЮТОНА

В основе нерелятивистской механики лежит второй закон Ньютона, утверждающий, что действующая на тело сила  $\mathbf{F}$  равна скорости изменения импульса тела  $\mathbf{p}$

$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \quad (1)$$

Система отсчета, в которой справедлив этот закон, носит название инерциальной. При одномерном движении тела массой  $m$  вдоль оси  $x$  со скоростью  $v$  и импульсом  $p = mv$  уравнение (1) имеет вид

$$F = ma = m \frac{dv}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2}, \quad (2)$$

где  $x$  — координата частицы,  $a$  — ее ускорение. Более общим выражением (1) следует пользоваться в случае изменения массы, как,

например, при ядерных реакциях, сопровождающихся рождением и аннигиляцией частиц. В динамике встречается несколько типов сил:

$F = mg$	сила притяжения вблизи поверхности Земли (сила тяжести)	(3а)
$\mathbf{F} = Gmm'\hat{\mathbf{r}}/r^2$	закон всемирного тяготения Ньютона	(3б)
$\mathbf{F} = qq'\hat{\mathbf{r}}/4\pi\epsilon_0 r^2$	закон Кулона	(3в)
$F = -k(x - x_0)$	сила упругости, возвращающая тело к положению равновесия $x_0$	(3г)
$F = -\mu N$	сила трения скольжения или покоя	(3д)
$F = -k v ^n$	сила жидкого трения; $n = 1$ в законе Стокса $F = 6\pi\eta rv$ при обтекании тела потоком; в случае турбулентности $n = 2$	(3е)
$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$	сила Лоренца, действующая на заряд $q$	(3ж)

Обычно задачи нерелятивистской механики проще всего решаются составлением уравнения баланса энергий в начале и в конце взаимодействия. Для системы  $n$  взаимодействующих частиц, в которой каждая  $i$ -я частица имеет кинетическую энергию  $\frac{1}{2}m_i v_i^2$  и потенциальную энергию  $V_i$ , мы можем записать

$$\sum \frac{1}{2}m_i v_{i\text{нач}}^2 + \sum V_{i\text{нач}} = \sum \frac{1}{2}m_i v_{i\text{кон}}^2 + \sum V_{i\text{кон}}, \quad (4)$$

где суммирование проводится по всем частицам системы. Если частицы взаимодействуют между собой, мы можем добавить к этому уравнению еще суммирование по начальной  $V_{ij}^{\text{нач}}$  и конечной  $V_{ij}^{\text{кон}}$  энергиям взаимодействия частиц системы. Подобный подход к решению задач годится только в случае консервативных систем, в которых отсутствуют диссипативные силы.

### 3. ФОРМУЛИРОВКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛАГРАНЖИАНА

В подходе с использованием лагранжиана кинетическая и потенциальная энергии выражаются через обобщенные координаты  $q_i$  и скорости  $\dot{q}_i$  каждой частицы. Сам лагранжиан  $L(q_1, q_2, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$

$\dots, \dot{q}_N, t)$  представляет собой разность между полной кинетической энергией  $T$  и полной потенциальной энергией  $V$  системы

$$L = T - V. \quad (5)$$

Примеры некоторых лагранжианов:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad \begin{array}{l} \text{гармонический} \\ \text{осциллятор} \end{array} \quad (6a)$$

$$\left. \begin{array}{l} L = -mc^2\gamma - q\phi + q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \\ L \approx \frac{1}{2}mv^2 - q\phi + q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - mc^2 \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{заряд } q \\ \text{в электромагнитном} \\ \text{поле } [\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}] \end{array} \quad (6b)$$

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + k/r \quad \begin{array}{l} \text{задача Кеплера} \\ \text{о движении Земли} \\ \text{по орбите} \\ \text{вокруг Солнца} \end{array} \quad (6b)$$

$$L = \frac{1}{2}I_{\perp}(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) + \frac{1}{2}I_{\parallel}(\dot{\psi} + \dot{\varphi} \cos \theta)^2 - mgl \cos \theta \quad (6g)$$

симметричный волчок, закрепленный в одной точке.

Использованы углы Эйлера:

$\psi$  — угол поворота волчка вокруг собственной оси,

$\varphi$  — угол прецессии вокруг вертикальной оси,

$\theta$  — угол отклонения от вертикали.

При записи лагранжиана следует иметь в виду три наиболее часто используемые системы координат с соответствующими дифференциалами  $ds_i = h_i dq_i$ :

$$\begin{array}{l} \text{декартовы : } x, y, \\ \quad dx, dy, dz, \end{array} \quad (7a)$$

$$\begin{array}{l} \text{цилиндрические : } \rho, \varphi, z, \\ \quad d\rho, \rho d\varphi, dz, \end{array} \quad (7b)$$

$$\begin{array}{l} \text{сферические : } r, \theta, \varphi, \\ \quad dr, r d\theta, r \sin \theta d\varphi. \end{array} \quad (7b)$$

Важность подхода с использованием лагранжиана заключается в том, что согласно принципу Гамильтона движение системы в интервале времени между  $t_1$  и  $t_2$  происходит по такому пути, для которого значение интеграла

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L dt \quad (8)$$

имеет экстремальное минимальное значение. Используя этот принцип, можно показать, что уравнению Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

удовлетворяет каждая из  $N$  координат  $q_i$  и скоростей  $\dot{q}_i$ .

Движение часто ограничено связями. Особый интерес представляют голономные связи, которые можно аналитически представить в виде уравнений, содержащих радиусы-векторы  $\mathbf{r}_i$  всех частиц, но не содержащих скоростей

$$f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = 0. \quad (10)$$

Если на систему наложены связи в виде неравенства, как, например, условие  $r^2 - a^2 \geq 0$ , означающее положение точек вне сферы радиусом  $a$ , то такие связи не будут голономными. Дифференциал  $df$  функции  $f(\mathbf{q}_i, t)$

$$df = \sum \frac{\partial f}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial f}{\partial t} dt = 0, \quad (11)$$

где суммирование производится по всем  $N$  частицам, может быть записан в форме

$$\sum a_i dq_i + a_t dt = 0, \quad (12)$$

где  $a_i = \partial f / \partial q_i$ . Если имеется несколько уравнений связи, необходимо ввести дополнительный индекс, записав  $a_{ji}$  и  $a_{jt}$ . Записанные в виде дифференциальных уравнений первого порядка коэффициенты  $a_{ji}$ , составляющие  $n$  уравнений связи,

$$\sum a_{ji} \dot{q}_i + a_{jt} dt = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (13)$$

входят в  $N$  уравнений Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = \sum a_{ji} \lambda_j \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (14)$$

через посредство  $n$  множителей Лагранжа  $\lambda_j$ , где суммирование по  $j$  производится от 1 до  $n$ . Таким образом, теперь имеется  $N+n$  уравнений и  $n$  неизвестных множителей Лагранжа, которые требуется определить. Каждый коэффициент  $\lambda_j$  обычно имеет размерность силы или момента силы и чаще всего представляет собой силу реакции.

Иногда связи могут быть записаны в виде уравнений (12) или (13), даже если функции  $f(q, t)$  не существуют. Такие связи можно назвать псевдоголономными; не являясь голономными, они могут тем не менее использоваться в методе множителей Лагранжа (14).

Иногда трение можно учесть, вводя зависящую от скорости диссипативную функцию Рэлея  $D$ ,

$$D = \frac{1}{2} \sum (k_x v_{ix}^2 + k_y v_{iy}^2 + k_z v_{iz}^2), \quad (15)$$

связанную с силой трения  $\mathbf{F}_f$

$$\mathbf{F}_f = -\nabla_v D, \quad (16)$$

где градиент берется по скоростям. В этом случае уравнения Лагранжа имеют вид

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} + \frac{\partial D}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (17)$$

Диссипативная функция Рэлея соответствует силе, определяемой  $(3e)$ , с  $n = 1$ .

Каждой координате  $q_j$  соответствует обобщенный импульс  $p_j$ , определяемый выражением

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}. \quad (18)$$

Обобщенный импульс может соответствовать обычному импульсу  $m\dot{x}$  либо моменту импульса  $I\dot{\theta}$ , где  $I$  — момент инерции, но может иметь более сложный вид, как, например, в случае движения заряда в магнитном поле  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Примеры некоторых обобщенных импульсов:

$$p_i = \gamma m v_i + q A_i \quad \begin{array}{l} \text{заряд } q \\ \text{в электромагнитном} \\ \text{поле} \end{array} \quad (19a)$$

$$\left. \begin{array}{l} p_r = m r \dot{\vartheta} \\ p_\theta = m r^2 \dot{\theta} \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{задача Кеплера} \\ \text{симметричный волчок,} \\ \text{закрепленный} \\ \text{в одной точке} \\ \text{(углы Эйлера)} \end{array} \quad (19b)$$

$$\left. \begin{array}{l} p_\theta = I_\perp \dot{\theta} \\ p_\psi = i_{||}(\dot{\psi} + \dot{\varphi} \cos \theta) \\ p_\varphi = (I_{||} \cos^2 \theta + I_\perp \sin^2 \theta) \dot{\varphi} + \\ + I_{||} \dot{\psi} \cos \theta \end{array} \right\} \quad (19b)$$

## 4. ФОРМУЛИРОВКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАМИЛЬТОНИАНА

Мы обсудили свойства лагранжиана  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ , являющегося функцией обобщенных координат и обобщенных скоростей. Существует еще одна функция, гамильтониан,  $\mathcal{H}(q_i, p_i, t)$ , которая зависит от

координат  $q_i$  и обобщенных импульсов  $p_i$ , определяемых согласно (18). Гамильтониан образуется из лагранжиана посредством преобразования Лежандра

$$\mathcal{H}(q_i, p_i, t) = \sum q_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t), \quad (20)$$

где суммирование осуществляется по всем координатам. Это преобразование для определения обобщенного импульса  $p_i$  связано с дифференцированием лагранжиана согласно (18). Затем полученные уравнения решаются относительно обобщенных скоростей  $\dot{q}_i$  и решения подставляются в выражение (20). Это приводит к гамильтониану как функции  $q_i, p_i$  и  $t$ . В некоторых случаях процедура упрощается, как, например, при наличии угла отклонения оси симметричного волчка от вертикали (19в), для которого можно записать

$$\dot{\theta} = p_\theta / I_\perp. \quad (21)$$

Значительно сложнее определить для случая симметричного волчка два других угла  $\psi$  и  $\varphi$ , для чего необходимо решить два совместных уравнения.

Уравнения движения выводятся из канонических уравнений Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad (22a)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad (22b)$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}. \quad (22c)$$

Эта система  $2N$  дифференциальных уравнений первого порядка заменяет  $N$  уравнений Лагранжа второго порядка (8).

Примеры некоторых гамильтонианов:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad \begin{array}{l} \text{гармонический} \\ \text{осциллятор} \end{array} \quad (23a)$$

$$\mathcal{H} = \left. \begin{array}{l} [(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 c^2 + m^2 c^4]^{1/2} + q\phi \approx \\ \approx \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi + mc^2 \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{заряд } q \\ \text{в электромагнитном} \\ \text{поле} \end{array} \quad (23b)$$

$$\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} - \frac{k}{r} \quad \text{задача Кеплера} \quad (23c)$$

$$\mathcal{H} = \left. \begin{array}{l} \frac{p_\theta^2}{2I_\perp} + \frac{(p_\varphi - p_\psi \cos\theta)^2}{2I_\perp \sin^2\theta} + \\ + Mg\ell \cos\theta \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{симметричный} \\ \text{волчок.} \end{array} \quad (23d)$$

Координаты, не входящие в явном виде в лагранжиан и гамильтониан, называются циклическими. Как следует из уравнения (22б), обобщенный импульс, соответствующий циклической координате, является интегралом движения, т. е. сохраняет не зависящее от времени постоянное значение, которое мы обозначим  $\alpha_i$ :

$$\dot{p}_i = 0, \quad (24)$$

$$p_i = \alpha_i. \quad (25)$$

Вследствие этого, чтобы записать уравнения движения в циклических координатах, обычно проще использовать гамильтониан, а в нециклических координатах — лагранжиан.

Если координаты  $q_1, \dots, q_c$  входят в лагранжиан в явном виде, а остальные координаты  $q_{c+1}, \dots, q_N$  являются циклическими, то целесообразно в выражении  $\sum q_i \dot{p}_i$  уравнения (20) проводить суммирование только по циклическим координатам и тем самым получить функцию Раяса  $R$

$$R = R(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_c, p_{c+1}, \dots, p_N), \quad (26)$$

которая является функцией скоростей  $\dot{q}_i$ , соответствующих нециклическим координатам, и постоянных импульсов  $p_i$ . Это позволяет записать уравнения Гамильтона для циклических координат и уравнения Лагранжа для нециклических координат. Например, в задаче Кеплера циклической координатой является  $\theta$ , и, согласно уравнениям (6в) и (19б), функция Раяса имеет вид

$$R(r, \theta, \dot{r}, p_\theta) = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + p_\theta^2 / 2mr^2 - k/r, \quad (27)$$

где момент импульса  $p_\theta = mr^2 \dot{\theta}$  остается постоянным во времени, так как координата  $\theta$  — циклическая.

## 5. ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ И ВИРТУАЛЬНЫЕ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ

Существует несколько общих принципов, используемых в механике. Мы уже знакомы с принципом Гамильтона (8), который утверждает, что интеграл от функции Лагранжа за некоторый промежуток времени принимает для истинного пути минимальное значение. Это же утверждение можно сформулировать следующим образом: вариация действия  $I$  (8) при фиксированных моментах времени  $t_1$  и  $t_2$  для истинного пути равна нулю

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt. \quad (28)$$

Другими словами, бесконечно малые отклонения от пути интегрирования относительно истинной траектории не изменяют значения интеграла.

Рассмотрим бесконечно малые перемещения  $\delta \mathbf{r}_i$  в системе, находящейся в равновесии под действием приложенной силы  $\mathbf{F}^{\text{прил}}$ . Принцип виртуальной работы утверждает, что условием равновесия в статике является равенство нулю виртуальной работы, т. е. работы, совершаемой приложенной силой

$$\sum \mathbf{F}_i^{\text{прил}} \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0. \quad (29)$$

В динамике, где приложенные силы могут вызвать ускорения  $\ddot{x} = \dot{p}_x/m$ , используется принцип Даламбера

$$\sum (\mathbf{F}_i^{\text{прил}} - \dot{\mathbf{p}}_i) \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0, \quad (30)$$

который в статике превращается в принцип виртуальной работы.

## ГЛАВА 2

---

# ЦЕНТРАЛЬНЫЕ СИЛЫ

---

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе мы сначала рассмотрим взаимодействие частиц, а затем задачу Кеплера о движении по замкнутой орбите под действием силы, обратно пропорциональной квадрату расстояния. Затем обсудим инфинитное движение и рассеяние, после чего сделаем некоторые замечания относительно проблемы трех тел.

## 2. ДЕЙСТВИЕ И ПРОТИВОДЕЙСТВИЕ

Если две частицы взаимодействуют друг с другом, то, согласно закону о действии и противодействии, силы этого взаимодействия равны по величине и противоположны по направлению. Частица  $m_1$  действует с силой  $\mathbf{F}_{12}$  на  $m_2$  и частица  $m_2$  действует с силой  $\mathbf{F}_{21}$  на  $m_1$ , так что

$$\mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21} = 0 \quad (1)$$

а согласно второму закону Ньютона,

$$m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 = 0, \quad (2)$$

где  $\mathbf{a}$  — ускорение. Если проинтегрировать это выражение по времени, причем интервал  $\Delta t$  настолько мал, что силы можно считать постоянными, то получим

$$m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 = \text{const}, \quad (3)$$

где константой может быть, например, импульс центра масс системы двух частиц. Таким образом, импульс системы двух частиц сохраняется. Закон сохранения импульса формулируется следующим образом: если на систему частиц не действуют внешние силы, то импульс системы остается постоянным. Если все действующие

между частицами системы внутренние силы подчиняются равенству (1), то в отсутствие внешних сил полный импульс системы остается постоянным во времени.

Если силы  $\mathbf{F}_{12}$  и  $\mathbf{F}_{21}$  не коллинеарны, то массы  $m_1$  и  $m_2$  приобретают момент импульса относительно друг друга. Следовательно, чтобы сохранялся момент импульса, силы, действующие между частицами системы, должны быть не только равны по величине и противоположны по направлению, но и направлены вдоль прямой, соединяющей эти частицы. Такие силы называют центральными. Если все внутренние силы являются центральными, то в отсутствие момента внешних сил полный момент импульса системы тел, как и импульс системы, остается постоянным во времени.

Движущиеся заряды могут действовать друг на друга с силами, которые не только не являются центральными, но и различаются по величине и направлению. Заряд  $q_1$ , движущийся с релятивистской скоростью, создает электрическое поле  $\mathbf{E}_1$ , составляющая напряженности которого в направлении, перпендикулярном движению, больше составляющей вдоль направления движения заряда, и кроме того, возникает магнитное поле  $\mathbf{B}_1$ , силовые линии которого представляют собой окружности вокруг траектории движения. Второй движущийся заряд  $q_2$  взаимодействует с электрическим и магнитным полями первого заряда с силой Лоренца  $\mathbf{F}_{12}$

$$\mathbf{F}_{12} = q_2(\mathbf{E}_1 + \mathbf{v}_2 \times \mathbf{B}_1), \quad (4a)$$

а сила действия второго заряда на первый  $\mathbf{F}_{21}$  равна

$$\mathbf{F}_{21} = q_1(\mathbf{E}_2 + \mathbf{v}_1 \times \mathbf{B}_1), \quad (4b)$$

т. е. в общем случае эти силы различаются и по величине, и по направлению. Ни импульс, ни момент импульса не остаются постоянными. В гл. 13 будет показано, что в объеме, содержащем заряды, токи и электромагнитные поля, скорость изменения импульса при движении заряженных частиц с учетом этих полей равна силам, действующим в пределах поверхности, ограничивающей этот объем.

### 3. ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ В СЛУЧАЕ ЦЕНТРАЛЬНЫХ СИЛ

В механике мы имеем дело с центральными силами, возникающими, например, из закона всемирного тяготения Ньютона. К таким отно-

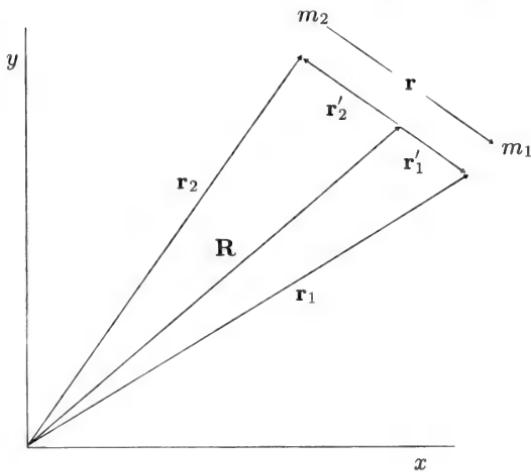


Рис. 2.1. Координаты в проблеме двух тел.

сится гравитационное взаимодействие двух масс  $m_1$  и  $m_2$ , которое мы запишем в скалярном виде

$$F = -G \frac{m_1 m_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}. \quad (5)$$

Из формулы (5) видно, что центральная сила  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{F}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \mathbf{F}(r) \quad (6)$$

выражается через скалярный потенциал  $V$ , где  $\mathbf{F} = -\nabla V$

$$V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r) = \frac{G m m'}{r}, \quad (7)$$

т. е. является функцией величины  $r$  вектора  $\mathbf{r}$

$$r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \quad (8)$$

равного расстоянию между двумя массами (рис. 2.1). На каждую из масс  $m_i$  действует сила  $\mathbf{F}_j$  со стороны другой массы  $m_j$  и, согласно первому закону Ньютона,

$$\mathbf{F}_1(r) = m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2, \quad (9a)$$

$$\mathbf{F}_2(r) = m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1, \quad (9b)$$

где из (1) следует  $\mathbf{F}_1(r) = -\mathbf{F}_2(r)$ . Однако векторные уравнения (9) не представляют практического интереса для расчета радиально-го и углового перемещений масс относительно друг друга, так как

этого нельзя вывести непосредственно из уравнений (9). Следовательно, необходимо использовать иной подход к решению проблемы центральных сил. Положения масс можно описать с помощью векторов  $\mathbf{r}'_1$  и  $\mathbf{r}'_2$  относительно центра масс и вектора  $\mathbf{R}$ , определяющего положение центра масс на рис. 2.1. Поскольку внешние силы отсутствуют, а действующие между частицами внутренние силы являются центральными, момент импульса  $\mathbf{L}$  остается постоянным, а движение относительно центра масс происходит в плоскости, перпендикулярной  $\mathbf{L}$ .

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (10)$$

Заметим также, что

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2, \quad (11)$$

так как  $\mathbf{r}'_1$  и  $\mathbf{r}'_2$  противоположно направлены.

Лагранжиан системы имеет следующий вид:

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}'_1{}^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}'_2{}^2 - V(|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2|). \quad (12)$$

Переход от переменных  $\mathbf{r}'_1$  и  $\mathbf{r}'_2$  к переменным  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{r}$  позволяет переписать лагранжиан в более удобной форме

$$L = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{r}^2 - V(r). \quad (13)$$

Поскольку координаты центра масс циклические, импульс центра масс системы остается постоянным

$$\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{v}_{CM} = \text{const}, \quad (14)$$

и нас интересуют только относительные координаты.

Так как движение происходит в плоскости, лагранжиан можно переписать в полярных координатах  $r, \theta$

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r), \quad (15)$$

а гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r). \quad (16)$$

Если угол  $\theta$  — циклическая координата, то канонические импульсы

$$p_r = m\dot{r}, \quad (17)$$

$$p_\theta = mr^2\dot{\theta} = L = \text{const.} \quad (18)$$

Не следует смешивать обозначение через  $L$  момента импульса и лагранжиана. Равенство (18), представляющее собой закон сохранения скорости  $\frac{1}{2}r^2d\theta/dt$ , является вторым законом Кеплера для движения планет и также устанавливает, что момент импульса сохраняется.

#### 4. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И ОРБИТЫ

И уравнение Лагранжа, и уравнение Гамильтона для радиальных координат приводят к следующему уравнению движения:

$$m\ddot{r} - \frac{p_\theta^2}{mr^3} = f(r), \quad (19)$$

где радиальная сила  $f(r)$

$$f(r) = -\frac{dV}{dr}. \quad (20)$$

Уравнение (19) может быть записано в виде

$$m\ddot{r} + \frac{d}{dr} \left( V(r) + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} \right) = 0 \quad (21)$$

и, используя соотношение

$$\frac{dg(r)}{dt} = \frac{dg(r)}{dr} \frac{dr}{dt} = \frac{dg(r)}{dt} \dot{r}, \quad (22)$$

его можно представить в форме, удобной для интегрирования

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} m\dot{r}^2 \right) + \frac{d}{dt} \left( V(r) + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} \right) = 0, \quad (23)$$

где выражение в скобках представляет собой эффективную потенциальную энергию  $V'$  (рис. 2.2).

$$V' = V + \frac{L^2}{2mr^2}. \quad (24)$$

Используя замену переменных  $u = 1/r$  и выражение  $Ldt = mr^2d\theta$ , из уравнения (18) можно вывести уравнение орбиты

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{L^2} \frac{d}{du} V(1/u). \quad (25)$$

Система консервативна, следовательно, энергия  $E$  является интегралом движения

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (26)$$

и это уравнение можно решить относительно  $\dot{r}$  и после интегрирования получить уравнение движения, т. е. зависимость  $r$  от времени. Орбиты, полученные при решении уравнения (26) в виде зависимости  $\theta$  от  $r$ , представляют собой траектории движения в пространстве. В случае гравитационного поля (7),  $V = -k/r$  и орбиты представляют собой конические сечения. Если полная энергия отрицательна, то траекторией служит замкнутая кривая, представляющая

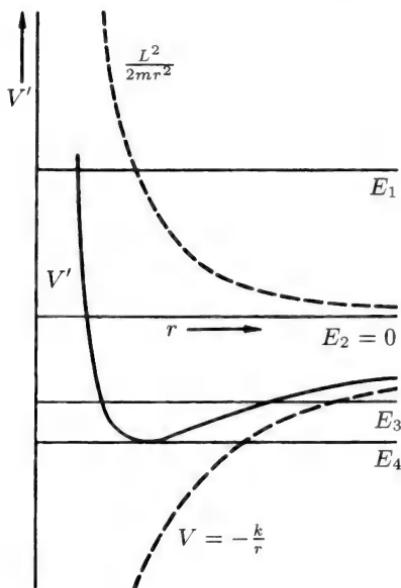


Рис. 2.2. Кулоновский ( $-k/r$ ), центробежный ( $L^2/2mr^2$ ) и суммарный одномерный ( $V'(r)$ ) потенциалы для взаимодействия по закону обратных квадратов. Показаны энергии, отвечающие гиперболической ( $E_1$ ), парabolической ( $E_2$ ), эллиптической ( $E_3$ ), и круговой ( $E_4$ ) орбитам. (Из книги: H. Goldstein, Classical Mechanics, 2nd Ed., Addison-Wesley, 1980, p 77.)

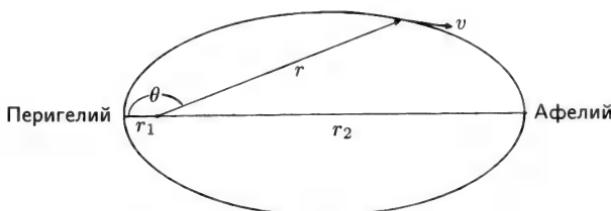


Рис. 2.3. Эллиптическая орбита в полярных координатах ( $r, \theta$ ); показаны перигелий — точка наибольшего сближения ( $r = r_1$ ) и афелий — точка наибольшего удаления ( $r = r_2$ ).

собой либо эллипс, либо окружность (рис. 2.3). Для положительных энергий траектория представляет собой гиперболу, а для энергии, равной нулю, траекторией служит парабола, т. е. в обоих случаях орбиты незамкнуты. Имеется минимальное значение энергии, равное  $E_{\min} = -mk^2/2L^2$ ; при меньших энергиях решения не существует. Орбиты различаются эксцентриситетом  $e$ , который зависит от энергии и момента импульса

$$e = 1 + \frac{2EL^2}{mk^2}. \quad (27)$$

Возможны следующие типы траекторий:

$$e > 1 \quad E > 0 \quad \text{гипербола}, \quad (28a)$$

$$e = 1 \quad E = 0 \quad \text{парабола}, \quad (28b)$$

$$0 < e < 1 \quad E < 0 \quad \text{эллипс}, \quad (28c)$$

$$e = 0 \quad E = \frac{mk^2}{-2L^2} \quad \text{окружность}. \quad (28d)$$

Эксцентриситет  $e$  может быть выражен через длины большой и малой полуосей  $a$  и  $b$  соответственно и через кратчайшее расстояние  $r_1$  (перигелий) и  $r_2$  (афелий) до фокуса:

$$e = 1 - \frac{b^2}{a^2}, \quad (29a)$$

$$= 1 - (r_1/a), \quad (29b)$$

$$= (r_2/a) - 1. \quad (29c)$$

причем длина большой полуоси зависит только от энергии

$$a = \frac{1}{2}(r_1 + r_2) = k/(-2E). \quad (30)$$

Эллиптическая орбита в полярных координатах имеет вид

$$r = \frac{a(1 - e^2)}{1 + e \cos \theta}, \quad (31)$$

где  $r$  — расстояние до фокуса, а в декартовых координатах

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (32)$$

причем начало координат совпадает с центром эллипса. На рис. 2.3 и 2.4 показаны величины  $r$ ,  $\theta$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $r_1$ ,  $r_2$ . Окружность является частным случаем эллипса с

$$a = b = r_1 = r_2 \quad (33)$$

и эксцентриситетом  $e = 0$ .

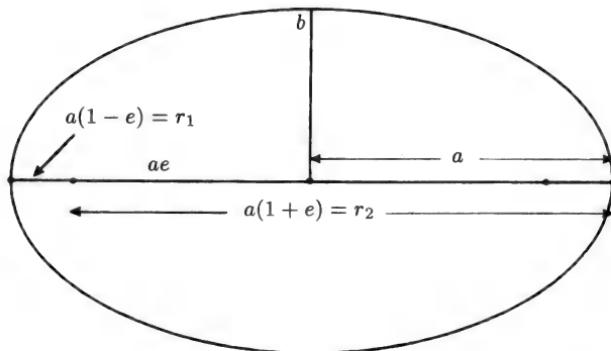


Рис. 2.4. Параметры эллиптической орбиты, рис. 2.3, выражены через эксцентриситет  $e$ , большую и малую полуоси, соответственно  $a$  и  $b$ .

Выражения, аналогичные случаю эллипса, могут быть написаны и для других конических сечений; для гиперболы

$$r = \frac{a(e^2 - 1)}{e \cos \theta + 1}. \quad (34)$$

У нее имеется расстояние максимального сближения  $r_0 = a(e - 1)$ , отвечающее углу  $\theta = 0$ , рис. 2.5, а угол  $\theta_0$ ,

$$\cos \theta_0 = 1/e, \quad (35)$$

характеризует наклон асимптоты при  $r \Rightarrow \infty$ .

## 5. ОГРАНИЧЕННЫЕ И ЗАМКНУТЫЕ ТРАЕКТОРИИ

Для многих сил притяжения существуют области энергий, при которых движение является финитным и радиусы траекторий  $r$  ограничены  $r_1$  и  $r_2$

$$r_1 \leq r \leq r_2, \quad (36)$$

как в случае эллипса. Если частоты радиального и азимутального движений кратны, т. е. их отношение  $\omega_r/\omega_\theta$  представляет собой отношение целых чисел, то траектория будет замкнутой, т. е. будет повторять себя или постоянно возвращаться на пройденный путь. На рис. 2.6 показаны случаи  $\omega_r/\omega_\theta = \frac{1}{2}$ , 1 и 2. Задача Кеплера, с силой, обратно пропорциональной квадрату  $r$ , является случаем  $\omega_r/\omega_\theta = 1$ .

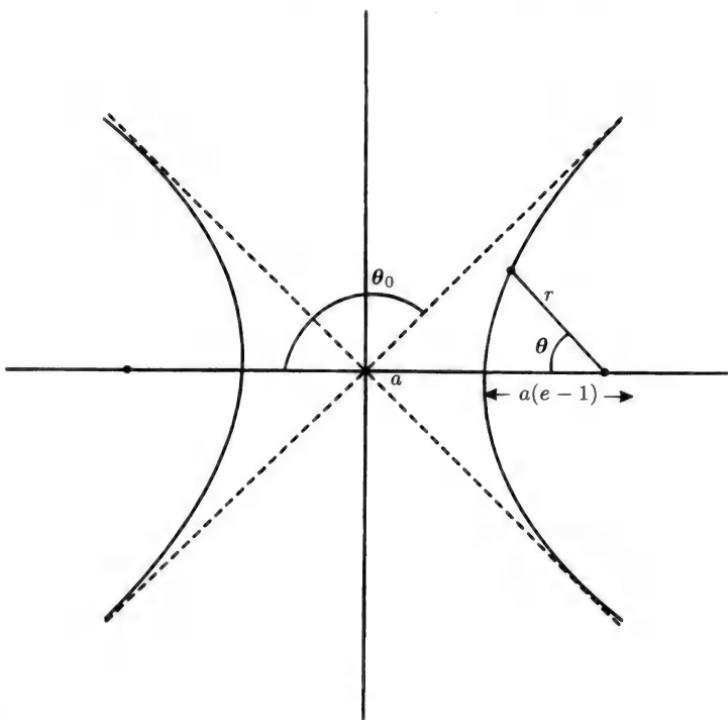
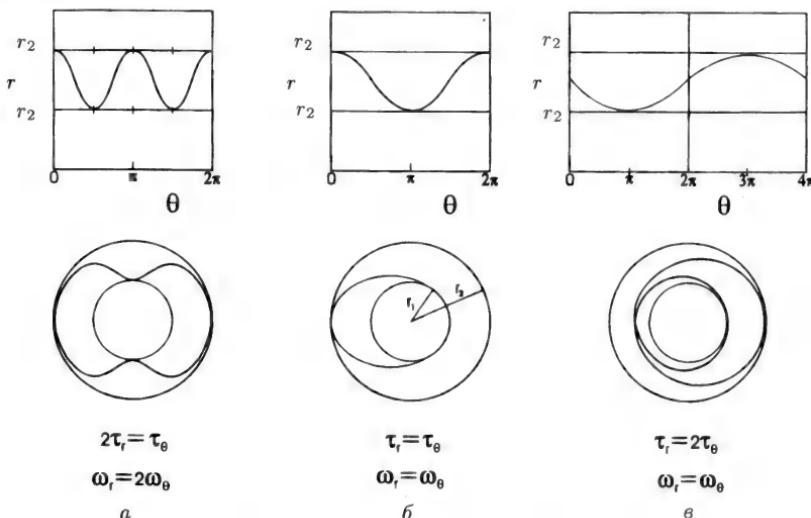


Рис. 2.5. Гиперболическая орбита (—) и ее асимптоты (---).

Если частоты не кратны, то траектории финитного движения бесчисленное число раз проходят область между  $r_1$  и  $r_2$ , заполняя кольцо между граничными окружностями, причем траектории никогда не совпадают (рис. 2.7, а). На рис. 2.7, б изображен случай очень малого отличия  $\omega_r/\omega_\theta$  от отношения целых чисел, как, например, в случае возмущения орбиты планеты. В 1873 г. Берtrand показал, что только в двух случаях траектории движений замкнуты: когда сила изменяется по закону обратных квадратов и потенциальная энергия  $V = -k/r$ , и в случае закона Гука для гармонического движения, когда  $V = \frac{1}{2}kr^2$ . Для других законов зависимости силы от  $r$  движение может быть финитным, но происходит по незамкнутым траекториям.

Теорема вириала основана на статистическом усреднении по времени механических характеристик системы. Чтобы избежать ее



**Рис. 2.6.** Замкнутые орбиты в полярных координатах (наверху) и в декартовых координатах (внизу). Случаи кратных частот: радиальная частота равна удвоенной азимутальной частоте (a), радиальная и азимутальная частоты равны (b) и азимутальная частота равна удвоенной радиальной частоте (c).

усложнения, рассмотрим среднюю кинетическую энергию  $\langle T \rangle$  системы частиц

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle. \quad (37)$$

Это выражение носит название теоремы вириала, а сумма величин в правой части называется вириалом Клаузиуса. Теорема вириала применима к периодическому движению, но она также может быть использована и в случае непериодического движения при условии, что координаты и скорости остаются конечными, т. е. существует верхняя граница вириала Клаузиуса. Эта теорема, например, может быть использована при выводе закона идеального газа. Для случая степенной зависимости потенциала

$$V(r) = ar^{n+1} \quad (38)$$

теорема вириала имеет особенно простую форму

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}(n+1)\langle V \rangle, \quad (39)$$

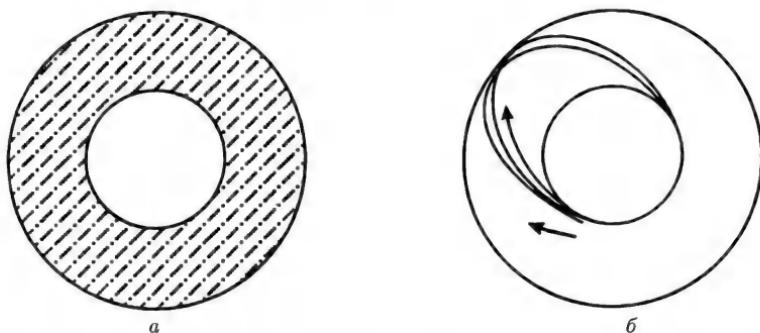


Рис. 2.7. Случай некратных частот, когда орбиты заполняют все пространство между  $r_1$  и  $r_2$  (а), и случай слабого возмущения, при котором орбита прецессирует (б).

что сводится к

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle \quad n = -2, \quad (40a)$$

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle \quad n = +1 \quad (40b)$$

для случая, когда сила обратно пропорциональна квадрату  $r$  ( $n = -2$ ), и случая гармонического осциллятора ( $n = +1$ ).

## 6. НЕЗАМКНУТЫЕ ТРАЕКТОРИИ И РАССЕЯНИЕ

Незамкнутые траектории наблюдаются при рассеянии пучка частиц на атомах мишени, например металлической фольги, и регистрации их детектором далеко за фольгой. При отсутствии детектора пучок уходит на бесконечность. Кинетическая энергия падающих частиц значительно превышает потенциальную энергию, и траектории представляют собой гиперболы, как и в случае силы, зависящей от  $r$  по закону обратных квадратов. В случае очень низкой кинетической энергии падающих частиц от источника, находящегося на конечном расстоянии, могут возникать финитные траектории.

Рассмотрим случай пучка, у которого интенсивность частиц, приходящихся на единицу площади поперечного сечения пучка в единицу времени, равна  $I$  и который проходит от центра рассеяния с «прицельным параметром»  $s$  (рис. 2.8). «Прицельный параметр»  $s$  — это расстояние максимального сближения при отсут-

ствии рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma/d\Omega$  в системе центра масс

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \left[ \begin{array}{l} \text{отношение числа частиц,} \\ \text{рассеиваемых в единицу времени} \\ \text{в интервал телесного угла} \\ \text{от } \Omega \text{ до } \Omega + d\Omega, \text{ к интенсивности} \\ \text{падающего пучка} \end{array} \right], \quad (41)$$

где

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (42)$$

Момент импульса  $L$

$$L = mv_0 s = s(2mE)^{1/2} \quad (43)$$

и мы можем записать

$$2\pi I s |ds| = 2\pi I (d\sigma/d\Omega) \sin \theta d\theta, \quad (44)$$

откуда для дифференциального сечения рассеяния получаем выражение

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{s}{\sin \theta} \left| \frac{ds}{d\theta} \right|. \quad (45)$$

Для сил, подчиняющихся закону обратных квадратов, мы получаем знаменитую формулу Резерфорда для сечения рассеяния частиц с зарядом  $Ze$  на частицах с зарядом  $Z'e$

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left\{ \frac{ZZ'e^2}{8\pi E_0 E} \right\}^2 \operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2}\theta. \quad (46)$$

Из рис. 2.9 видно, что чем больше прицельный параметр  $s$ , тем

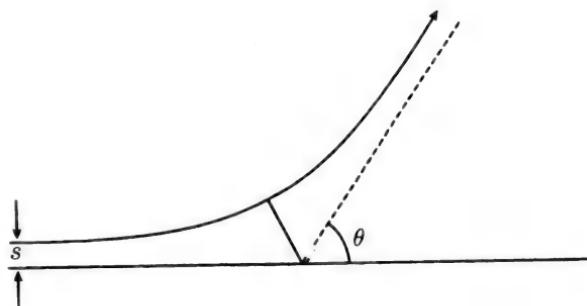


Рис. 2.8. Гиперболическая инфинитная траектория (прицельный параметр  $s$ , угол рассеяния  $\theta$ ).

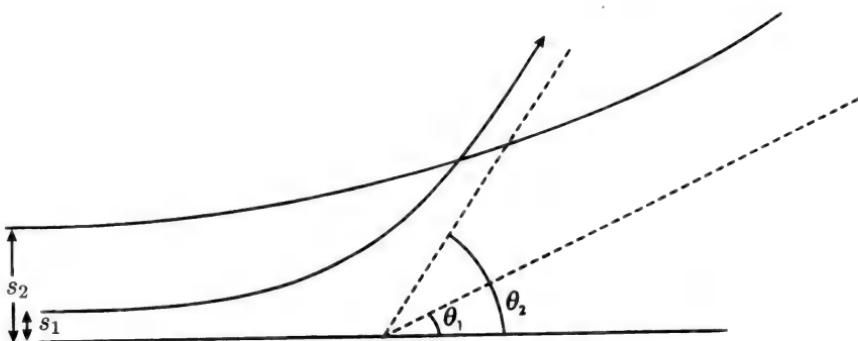


Рис. 2.9. Гиперболические траектории с малым ( $s_1$ ) и большим ( $s_2$ ) прицельными параметрами, соответствующие большому ( $\theta_1$ ) и малому ( $\theta_2$ ) углам рассеяния.

меньше угол рассеяния  $\theta$ . Этот результат эквивалентен решению проблемы одного тела, что соответствует случаю, когда масса рассевающей частицы велика по сравнению с массой рассеиваемой частицы. Центр масс можно считать совпадающим с рассеивающей частицей, которая практически остается неподвижной.

В более общем случае угол рассеяния  $\theta_L$  в лабораторной системе отсчета связан с углом рассеяния в системе центра масс соотношением

$$\operatorname{tg} \theta_L = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \rho}, \quad (47)$$

где в случае упругого столкновения

$$\rho = \frac{m_1}{m_2}. \quad (48)$$

Это означает, что для падающих частиц с малой массой  $m_1 \ll m_2$  (случай Резерфорда) углы рассеяния в обеих системах практически одинаковы  $\theta_L \approx \theta$ . В противоположном случае,  $m_1 \gg m_2$ , мы имеем  $\theta_L \ll \theta$ , так что более тяжелая падающая частица  $m_1$  испытывает очень малое отклонение, которое практически невозможно измерить на опыте. В случае неупругого столкновения часть кинетической энергии переходит в тепло  $Q$  и  $\rho$  зависит от величины  $Q$ .

## 7. ЗАДАЧА ТРЕХ ТЕЛ

Решение задачи о движении двух тел, взаимодействие между которыми изменяется по закону обратных квадратов, приводит к элли-

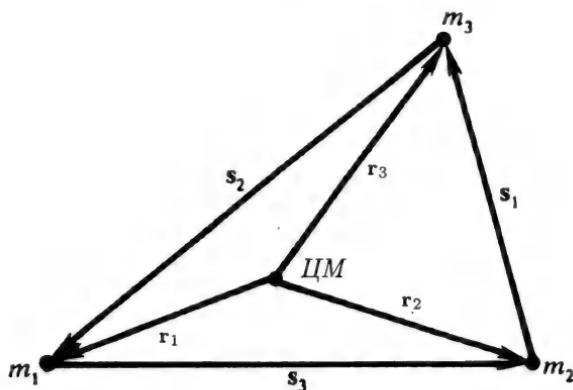


Рис. 2.10. Векторы  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{r}_3$ , определяют положения масс  $m_1$ ,  $m_2$  и  $m_3$ , а  $\mathbf{s}_1$ ,  $\mathbf{s}_2$  и  $\mathbf{s}_3$  определяют их относительные положения. (Из книги: D. Hestenes, New Foundations for Classical Mechanics, Reidel, Dordrecht, 1986, p. 401.)

птической, параболической или гиперболической траекториям, причем в случае эллиптической траектории движение происходит по замкнутой орбите. Если дополнить систему еще одним телом, то возникает проблема трех тел, которая не имеет решения в общем виде. Однако в случае специального взаимного расположения масс уравнения движения настолько упрощаются, что их решения могут быть представлены в элементарных функциях. К тому же если две массы велики, а третья масса — мала, то для решения задачи может быть использован метод возмущений.

Задача трех тел — задача о движении масс  $m_1$ ,  $m_2$  и  $m_3$ , положения которых задаются векторами  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{r}_3$  и которые взаимно притягиваются по закону тяготения Ньютона. Уравнение движения тела с массой  $m_1$  имеет вид

$$\ddot{\mathbf{r}}_1 = -Gm_2 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} - Gm_3 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|^3}; \quad (49)$$

аналогичные уравнения можно записать и для двух других масс. Для определения их взаимного расположения введем векторы  $\mathbf{s}_i$  (рис. 2.10)

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k, \quad (50)$$

откуда видно, что

$$\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 = 0, \quad (51)$$

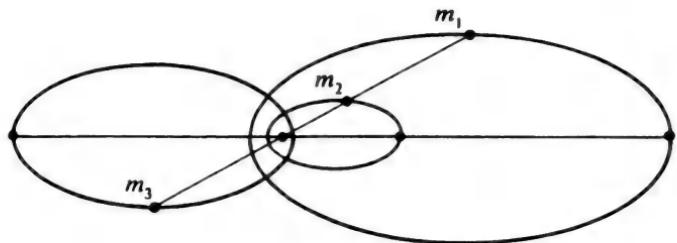


Рис. 2.11. Эллиптические орбиты для задачи трех тел Эйлера, в которой массы расположены на одной прямой и  $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$ . (Из книги: D. Hestenes, New Foundations for Classical Mechanics, Reidel, Dordrecht, 1986, p. 403.)

и уравнения движения принимают симметричную форму

$$\ddot{\mathbf{s}}_1 = -mG \frac{\mathbf{s}_1}{s_1^3} + m_1 \mathbf{G}, \quad (52)$$

где  $m$  — сумма трех масс

$$m = m_1 + m_2 + m_3, \quad (53)$$

а вектор  $\mathbf{G}$  задается выражением

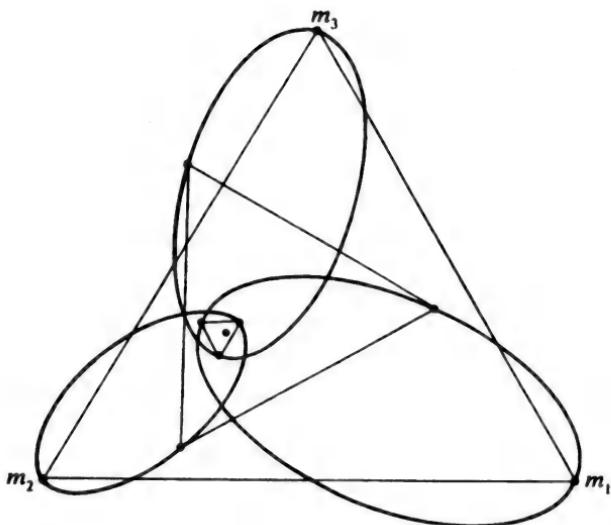
$$\mathbf{G} = G \left\{ \frac{\mathbf{s}_1}{s_1^3} + \frac{\mathbf{s}_2}{s_2^3} + \frac{\mathbf{s}_3}{s_3^3} \right\}. \quad (54)$$

Уравнения (52), записанные в симметричной форме, позволяют решить проблему трех тел в некоторых простых случаях.

Например, существует решение для случая, когда масса  $m_2$  расположена на прямой, соединяющей две другие массы, так что четыре вектора  $\mathbf{s}_1$ ,  $\mathbf{s}_2$  и  $\mathbf{s}_3$  и  $\mathbf{G}$  — коллинеарны. На рис. 2.11 представлено решение для отношения масс  $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$  и отрицательной энергии (эллиптическая траектория).

Решение также может быть получено, если вектор  $\mathbf{G} = 0$ , так что уравнения движения не связаны, и это отвечает случаю, когда массы расположены в вершинах правильного треугольника. При движении условие правильности треугольника сохраняется, но изменяются размеры и ориентация треугольника. На рис. 2.12 представлены эллиптические траектории, являющиеся решением в случае прежнего соотношения масс  $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$ .

В проблеме трех тел могут встречаться различные случаи. Если полная энергия положительна, то все три массы могут удаляться друг от друга, либо одна может удалиться, оставив две другие на



**Рис. 2.12.** Эллиптические орбиты для задачи трех тел Лагранжа, в которой массы расположены в вершинах равностороннего треугольника и  $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 2 : 3$ . (Из книги: D. Hestenes, New Foundations for Classical Mechanics, Reidel, Dordrecht, 1986, p. 404.)

финитных эллиптических орбитах. Если энергия отрицательна, одна масса может удалиться, оставив две другие в связанном состоянии, или все три массы будут оставаться на финитных орбитах, как показано на рис. 2.11 и 2.12.

Частным случаем проблемы трех тел является задача о связанным движении двух масс и возмущении, вызываемом третьим телом. Примерами служат движение космического корабля между Землей и Луной или влияние Солнца на орбиту Луны. В задаче о космическом корабле Земля и Луна в первом приближении движутся по невозмущенным орбитам, и спутник взаимодействует с ними по закону обратных квадратов. Мы должны также отметить, что орбиты спутника на высоте 150 км от Земли испытывают возмущение, обусловленное несферической формой Земли.

# ГЛАВА 3

---

## ДВИЖЕНИЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе мы рассмотрим вращательные движения твердых тел. Это рассмотрение включает матрицы вращения, преобразования векторов и тензоров, четность, представление вращения в двумерном пространстве, вращающиеся тела, вращающиеся системы координат и силы Кориолиса. Следующая глава будет посвящена колебательным движениям, которые возникают, если тело не является абсолютно твердым, и другим аспектам колебательных движений.

### 2. ПРИРОДА И ОПИСАНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Твердое тело состоит из частиц, взаимное расположение которых относительно друг друга остается постоянным. Рассмотрим совокупность  $N$  атомов, положение каждого из которых характеризуется координатами  $x, y, z$ . Эти  $3N$  координаты необходимы для задания положения тела. Если  $N$  атомов образуют твердое тело, то для них должно выполняться следующее условие: расстояние между каждой парой атомов  $r_{ij}$  остается неизменным

$$r_{ij} = r_{ji} = \text{const} \quad \text{для всех } i, j. \quad (1)$$

Твердое тело может двигаться в пространстве, и в любой момент времени его положение задается координатами его центра масс  $x_{\text{цм}}, y_{\text{цм}}$  и  $z_{\text{цм}}$ . Ориентация определяется направляющими косинусами  $\cos \theta_{ij}$  углов  $\theta_{ij}$ , показанных на рис. 3.1 и определяющими ориентацию осей системы координат, связанной с телом, относительно неподвижной системы координат, причем начала координат обеих систем совпадают с центром масс тела. Другой способ связан с вве-

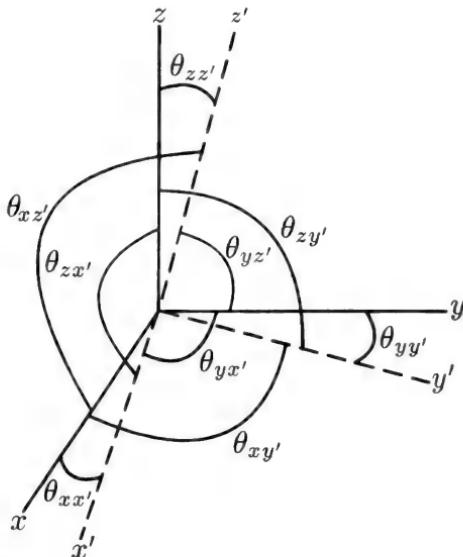


Рис. 3.1. Направляющие косинусы углов  $\theta_{ij}$  между осями  $xyz$  и  $x'y'z'$  декартовых систем координат.

дением полярных углов  $\theta$ ,  $\varphi$  некой оси и угла поворота  $\psi$  вокруг этой оси, который приводит к совпадению обеих систем координат. В любом случае для описания положения твердого тела необходимы шесть независимых координат — три определяют положение центра масс, и три — ориентацию тела; первые три представляют собой декартовы координаты, а вторые три — угловые. Один из наиболее удобных выборов трех углов для задания ориентации тела был предложен Эйлером (рис. 3.2): угол  $\varphi$  задает поворот вокруг оси  $z$ , угол  $\theta$  — вокруг новой оси  $x$ , и наконец,  $\psi$  — вокруг новой оси  $z$ ; соответствующая матрица вращений

$$R_{\text{Эйлер}} = R_z(\psi)R_x(\theta)R_z(\varphi). \quad (2)$$

Эта последовательность вращений, называемая операцией выбора осей  $zzz$ , отбирает предпочтительное направление, а именно направление  $z$ , которое хорошо подходит для рассмотрения систем с осевой симметрией, таких, как, например, вращающийся симметричный волчок, или для изучения эффекта Зеемана.

Пилоты самолетов используют следующую систему координат  $xyz$  для характеристики вращений вокруг осей этой декартовой сис-

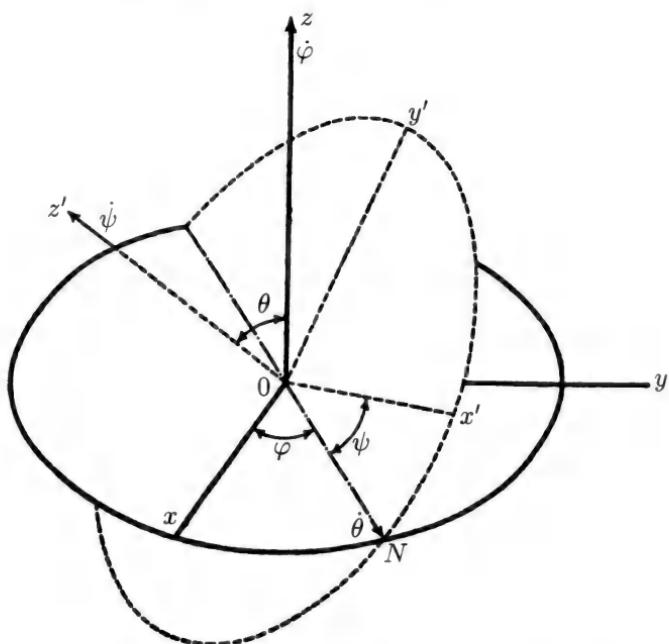


Рис. 3.2. Три последовательных поворотов на углы Эйлера  $\varphi, \theta, \psi$  для перехода от координат  $xyz$  к координатам  $x'y'z'$ . (Из книги: H. Goldstein, Classical Mechanics, 2nd Ed., Addison-Wesley, 1980, p. 146.)

темы, связанной с самолетом: ось  $x$  направлена вдоль фюзеляжа самолета от носа к хвосту, ось  $y$  — вдоль крыльев самолета и ось  $z$  — вертикально для характеристики высоты полета, как показано на рис. 3.3. Направление полета изменяется поворотом на угол  $\varphi$  относительно оси  $z$ , т. е. операцией, называемой изменением курса, или рысканьем. Она сопровождается креном или виражом — поворотом на угол  $\psi$  вокруг оси  $x$ . Третья операция, называемая изменением угла наклона, или изменением угла тангажа, вызывается поворотом самолета в воздухе относительно оси  $y$  для того, чтобы начать набор высоты или спуск. Велосипедист выполняет вираж, поворачивая за угол, и инстинктивно наклоняется при повороте, иначе велосипед мог бы упасть. Подъем или спуск с холма представляет собой изменение угла тангажа.

Отметим три основные теоремы, касающиеся ориентаций твердого тела.

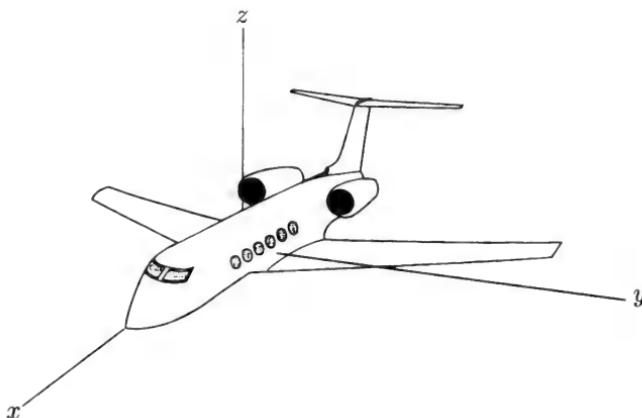


Рис. 3.3. Система координат  $xyz$ , связанная с самолетом. Вираж, изменение угла тангла и рысканье — это повороты вокруг осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , соответственно.

1. Теорема Эйлера утверждает, что наиболее общее перемещение твердого тела, имеющего одну неподвижную точку, представляет собой вращение.
2. Действительная ортогональная матрица, описывающая вращение в трех измерениях, имеет детерминант  $+1$  и одно собственное значение  $+1$ . Другие два собственных значения — комплексно сопряженные типа  $e^{i\varphi}$  и  $e^{-i\varphi}$ .
3. Теорема Шаля утверждает, что наиболее общее перемещение твердого тела представляет поступательное перемещение плюс вращение, и эти операции коммутативны.
4. Вращения в общем случае не коммутативны. Однако бесконечно малые вращения тела коммутативны в первом порядке.

### 3. МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЯ

Ортогональная матрица вращения состоит из направляющих косинусов углов, изображенных на рис. 3.1,

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta_{xx} & \cos \theta_{xy} & \cos \theta_{xz} \\ \cos \theta_{yx} & \cos \theta_{yy} & \cos \theta_{yz} \\ \cos \theta_{zx} & \cos \theta_{zy} & \cos \theta_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Направляющие косинусы удовлетворяют условиям ортогональности

$$\sum \cos \theta_{ij} \cos \theta_{ik} = \sum \cos \theta_{ji} \cos \theta_{ki} = \delta_{jk} \quad (4)$$

и детерминант  $R$  равен +1:

$$|R| = +1. \quad (5)$$

Для вращения вокруг оси  $z$  матрица направляющих косинусов (3) может быть сведена к

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Аналогичные выражения могут быть написаны для  $R_x$  и  $R_y$ .

Формулы преобразований (2) и (3) не содержат операций инверсии или отражения и называются собственными вращениями. Легко видеть, что любые две матрицы собственных вращений можно получить одну из другой с помощью последовательных бесконечно малых вращений, при которых, например,  $\varphi$  в (6) заменяется на  $d\varphi$ . Эта последовательность отвечает постепенному повороту вектора от одной ориентации в пространстве к другой.

Если имеет место операция инверсии, при которой  $x \Rightarrow -x$ ,  $y \Rightarrow -y$  и  $z \Rightarrow -z$ , то вращение называется несобственным. Инверсия переводит вектор  $\mathbf{V}$  с помощью матрицы  $I$  в противоположный ему  $\mathbf{V} \Rightarrow -\mathbf{V}$ .

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Отражению относительно плоскости  $x, y$  ( $x \Rightarrow x, y \Rightarrow y, z \Rightarrow -z$ ) отвечает матрица

$$\sigma_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Аналогичные выражения могут быть записаны для  $\sigma_{yz}$  и  $\sigma_{zx}$ . Необходимо отметить, что детерминант матрицы инверсии или отражения равен  $-1$ .

Вообще, произведение матриц типа  $RI = IR$  и  $R\sigma = \sigma R$ , где  $I$ ,  $\sigma$  и матрица собственного вращения  $R$  коммутируют, образует

матрицу несобственного вращения с детерминантом, равным  $-1$ . Примером служит  $IR_z(\varphi)$ , что легко показать, используя (6) и (7):

$$IR_z(\varphi) = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Как и в случае собственного вращения, любые две матрицы несобственного вращения могут быть получены одна из другой посредством последовательных бесконечно малых несобственных вращений. Группы собственных и несобственных вращений не связаны в том смысле, что никакая последовательность бесконечно малых собственных вращений не может перевести собственное вращение в несобственное, и наоборот. Правую руку нельзя преобразовать в левую непрерывным способом, а лишь внезапно путем отражения в зеркале!

#### 4. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ВЕКТОРОВ И ТЕНЗОРОВ

Вращение на угол  $\varphi$  вокруг оси  $z$  переводит вектор  $\mathbf{V}$  в  $\mathbf{V}'$ :

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} V'_x &= V_x \cos \varphi + V_y \sin \varphi, \\ V'_y &= -V_x \sin \varphi + V_y \cos \varphi, \\ V'_z &= V_z, \end{aligned} \quad (11)$$

и величина  $|\mathbf{V}|$  сохраняется

$$V'^2_x + V'^2_y + V'^2_z = V_x^2 + V_y^2 + V_z^2. \quad (12)$$

При повороте (изменении ориентации) тензора  $T$  с помощью преобразования подобия

$$RTR^{-1} = T' \quad (13)$$

его след сохраняется

$$T'_{xx} + T'_{yy} + T'_{zz} = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}. \quad (14)$$

Если тензор симметричный ( $T_{ij} = T_{ji}$ ) или антисимметричный ( $T_{ij} = -T_{ji}$ ), то при преобразовании подобия тип симметрии сохраняется. Вращения, представленные в матричной форме, можно

также записать аналитически с использованием тензорного обозначения

$$V'_i = \sum R_{ij} V_j, \quad (15)$$

$$T'_{ij} = \sum R_{im} R_{jn} R_{mn}, \quad (16)$$

где  $R_{ij} = \cos \theta_{ij}$  — направляющие косинусы, суммирование  $i = 1, 2, 3$  производится по координатам  $x, y, z$  и элементы матрицы  $R_{ij}$  подчиняются условию ортогональности (4).

## 5. ЧЕТНОСТЬ

Более общее название операции инверсии — изменение четности, обозначаемое  $P$ . Эта операция переводит координаты вектора  $\mathbf{r}$  в координаты противоположного ему вектора  $-\mathbf{r}$ , и соответствует замене  $x \Rightarrow -x, y \Rightarrow -y, z \Rightarrow -z$ . Выше мы отмечали, что эта операция изменяет направление вектора, не влияя на его величину, и она также не влияет на скаляр. Эта операция не оказывает влияния и на тензор второго ранга. Указанные факты собраны в табл. 3.1. Мы видим, что скаляры представляют собой тензоры нулевого ранга, векторы — тензоры первого ранга, а то, что мы обычно называем тензорами, правильнее называть тензорами второго ранга.

Существуют также тензоры более высоких рангов, и аналогичная терминология используется для их псевдоаналогов. Как видно из таблицы, тензоры нечетного ранга — нечетные, а тензоры четного ранга — четные; в случае псевдотензоров четность противоположная.

Например, псевдовектор, который иногда называют аксиальным вектором, представляет собой векторное произведение  $\mathbf{C}$  двух векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B}. \quad (17)$$

Таблица 3.1. Четности тензоров и псевдотензоров низшего ранга.

Величина	Ранг	Четность	Псевдовеличина	Ранг	Четность
Скаляр	0	+	псевдоскаляр	0	-
Вектор	1	-	псевдовектор (аксиальный вектор)	1	+
Тензор	2	+	псевдотензор	2	-

Операция  $P$  изменяет направление каждого вектора  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  на противоположное так, что направление векторного произведения остается неизменным

$$P(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (P\mathbf{A}) \times (P\mathbf{B}) = -(\mathbf{A}) \times (-\mathbf{B}) = \mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C}. \quad (18)$$

демонстрируя тем самым, что  $\mathbf{C}$  — псевдовектор.

## 6. ДВУМЕРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВРАЩЕНИЙ

Мы рассмотрели обычный подход к описанию вращения векторов и тензоров с помощью матрицы вращений  $3 \times 3$ . Существует также описание вращений с помощью матрицы  $2 \times 2$ , которое играет важную роль в современной теории, но не представляет практического интереса в механике. Тем не менее целесообразно привести соответствующие данные.

В этом методе векторы записываются в виде комплексных эрмитовых матриц  $2 \times 2$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_z & (V_x - iV_y) \\ (V_x + iV_y) & -V_z \end{pmatrix}, \quad (19)$$

которые допускают преобразование подобия с использованием унитарной матрицы вращения второго порядка

$$V' = QVQ^{-1} \quad (20)$$

где, например, повороту на угол  $\theta$  вокруг осей  $x, y, z$  соответствуют

$$Q_x = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta & i \sin \frac{1}{2}\theta \\ i \sin \frac{1}{2}\theta & \cos \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}, \quad (21a)$$

$$Q_y = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta & \sin \frac{1}{2}\theta \\ -\sin \frac{1}{2}\theta & \cos \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}, \quad (21b)$$

$$Q_z = \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix}. \quad (21b)$$

Эти матрицы могут быть записаны с помощью спиновых матриц Паули

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

образующих вектор в декартовой системе координат:

$$\sigma = \mathbf{i}\sigma_x + \mathbf{j}\sigma_y + \mathbf{k}\sigma_z. \quad (23)$$

Выражение (19) приобретает вид

$$\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma} = V_x \sigma_x + V_y \sigma_y + V_z \sigma_z, \quad (24)$$

и унитарные матрицы вращения (21) можно использовать для описания поворота  $Q_n$  на угол  $\theta$  вокруг оси с направляющим единичным вектором  $\mathbf{n}$

$$Q_n = I \cos \frac{1}{2}\theta + i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \frac{1}{2}\theta, \quad (25)$$

где  $I$  — единичная матрица  $2 \times 2$ , и (25) приобретает экспоненциальную форму записи

$$Q_n = \exp[i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\theta/2)], \quad (26)$$

что можно показать, разложив экспоненту в степенной ряд и используя циклические перестановки и коммутативные свойства матриц Паули, которые приведены в гл. 27, разд. 6.

## 7. ВРАЩАЮЩАЯСЯ СИСТЕМА КООРДИНАТ И СИЛА КОРИОЛИСА

Найдем выражение для вектора в двух системах координат, начала которых совпадают, но одна неподвижна, а другая вращается с постоянной угловой скоростью  $\omega$ . Посмотрим, как меняются уравнения движения при переходе от неподвижной инерциальной системы координат к неинерциальной вращающейся системе координат.

Рассмотрим скорость  $\mathbf{v}_s = (d\mathbf{r}/dt)_s$ , где вектор  $\mathbf{r}$  соответствует неподвижной системе. Этот вектор скорости связан с вектором скорости  $\mathbf{v}_r = (d\mathbf{r}/dt)_r$  во вращающейся системе следующим образом:

$$\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_r + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (27)$$

. Ускорение  $\mathbf{a}_s$  в неподвижной системе координат

$$\mathbf{a}_s = \left( \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} \right)_s = \left( \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} \right)_r + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_s \quad (28)$$

можно найти, подставляя выражение (27) в (28)

$$\mathbf{a}_s = \mathbf{a}_r + 2(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_r) + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}), \quad (29)$$

где  $\mathbf{a}_r = (d\mathbf{v}_r/dt)_r$ . Сила  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}_s$  в неподвижной инерциальной системе и эффективная сила  $\mathbf{F}_{\text{эфф}} = m\mathbf{a}_r$  в неинерциальной вращающейся системе связаны следующим образом:

$$\mathbf{F}_{\text{эфф}} = \mathbf{F} - 2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_r) - m\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}), \quad (30)$$

где второй и третий члены в правой части выражения представляют собой силу Кориолиса  $\mathbf{F}_{\text{Кор}}$  и центробежную силу  $\mathbf{F}_{\text{центр}}$  соответственно

$$\mathbf{F}_{\text{Кор}} = -2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_r), \quad (31)$$

$$\mathbf{F}_{\text{центр}} = -m\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (32)$$

и в случае вращения Земли последняя сила имеет величину

$$F_{\text{центр}} = m\omega^2 r \sin \theta \approx \quad (33)$$

$$\approx 0,0035mg \sin \theta. \quad (34)$$

В северном полушарии сила Кориолиса вызывает ветры, циркулирующие против часовой стрелки в области низкого давления, и вызывает отклонение свободно падающих тел к востоку от вертикали.

Закон всемирного тяготения Ньютона [гл. 2, выражение (5)] утверждает, что одно тело вызывает перемещение другого тела вдоль прямой, соединяющей тела, и это происходит в инерциальной системе, т. е. в системе, где выполняется второй закон Ньютона  $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ . Свободно падающее на Землю тело не испытывало бы отклонения, если бы Земля не вращалась. Наблюдаемое отклонение тела показывает, что системы координат, связанные с вращающейся Землей, не являются инерциальными.

## 8. ВРАЩАЮЩИЕСЯ ТЕЛА

Мы рассмотрели энергию, связанную с перемещением твердых тел. Если твердое тело вращается, его кинетическая энергия определяется выражением

$$T = \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega} \cdot I\boldsymbol{\omega} = \quad (35)$$

$$= \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{L} = \quad (36)$$

$$= \frac{1}{2}I\omega^2, \quad (37)$$

где  $\mathbf{L}$  — момент импульса, и  $I$  — момент инерции

$$\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega} \quad (38)$$

Тензор скалярного момента инерции  $I$  относительно оси, направление которой задается единичным вектором  $\hat{\mathbf{n}}$ , равен

$$I = \hat{\mathbf{n}} \cdot I \hat{\mathbf{n}} = \quad (39)$$

$$= \sum m_i [r_i^2 - (\mathbf{r}_i \cdot \hat{\mathbf{n}})^2] = \quad (40)$$

$$= \sum m_i (\mathbf{r}_i \times \hat{\mathbf{n}}) \cdot (\mathbf{r}_i \times \hat{\mathbf{n}}) \quad (41)$$

и для тела с плотностью  $\rho$  главный момент инерции относительно оси  $x$  равен

$$I_{xx} = \int \rho(r^2 - x^2) d\tau = \quad (42a)$$

$$= \int \rho(y^2 + z^2) d\tau. \quad (42b)$$

На рис. 3.4 представлены моменты инерции некоторых тел.

Согласно теореме о моментах инерции относительно параллельных осей момент инерции  $I$  тела массой  $M$  относительно произвольной оси равен

$$I = I_{CM} + Md^2, \quad (43)$$

где  $I_{CM}$  — момент инерции тела относительно оси, проходящей через центр масс,  $d$  — расстояние между этими осями.

Вращательное движение твердого тела относительно неподвижной точки под действием момента силы  $\mathbf{N}$  описывается уравнением

$$I_{xx}\dot{\omega}_x - \omega_y\omega_z(I_{yy} - I_{zz}) = N_x. \quad (44)$$

Аналогичные уравнения записываются и для двух других направлений, причем начало системы координат совмещено с неподвижной точкой; система движется вместе с телом, и главной оси соответствует  $I_{ij} = 0$  для  $i \neq j$ . Для симметричного волчка

$$I_{\perp} = I_{xx} = I_{yy}, \quad (45a)$$

$$I_{\parallel} = I_{zz}, \quad (45b)$$

$$\Delta I = (I_{\perp} - I_{\parallel}) \quad (45b)$$

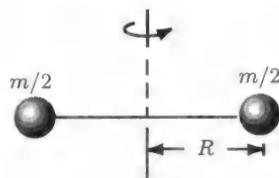
мы имеем

$$I_{\perp}\dot{\omega}_x - \omega_y\omega_z\Delta I = N_x, \quad (46a)$$

$$I_{\perp}\dot{\omega}_y + \omega_z\omega_x\Delta I = N_y, \quad (46b)$$

$$I_{\parallel}\dot{\omega}_z = N_z. \quad (46b)$$

Система двух шаров относительно оси, перпендикулярной соединяющему их стержню и проходящей через его середину. Масса стержня пренебрежимо мала



$$I = mR^2$$

Тонкое кольцо относительно оси, проходящей через его центр



$$I = mR^2$$

Диск относительно оси, проходящей через его центр



$$I = \frac{1}{2}mR^2$$

Шар относительно оси, совпадающей с любым диаметром



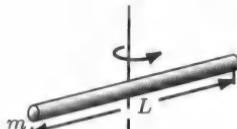
$$I = \frac{2}{5}mR^2$$

Стержень относительно оси, проходящей через его конец и перпендикулярной стержню



$$I = \frac{1}{3}mL^2$$

Стержень относительно оси, проходящей через его середину и перпендикулярной стержню



$$I = \frac{1}{12}mL^2$$

Диск относительно оси, проходящей через точку на краю диска (параллельно оси симметрии)



$$I = \frac{3}{2}mR^2$$

Рис. 3.4. Моменты инерции некоторых твердых тел. (Из книги: E. R. Jones, R. E. Childers, Contemporary College Physics, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1993, p. 247.)

Лагранжиан и канонические импульсы этого волчка, выраженные с помощью углов Эйлера, даны в гл. 1. Волчок вращается вокруг своей оси со скоростью  $\dot{\psi}$  и прецессирует вокруг вертикали со скоростью  $\dot{\phi}$ ; при этом его ось качается (это движение называется нутацией) и ее угол меняется от минимального угла наклона  $\theta_{\min}$  до максимального  $\theta_{\max}$ . Когда  $\theta$  уменьшается, волчок поднимается, и происходит увеличение его потенциальной энергии, равное  $MgL \cos \theta$ , что приводит к уменьшению угловых скоростей вращения и движения, т. е. уменьшению кинетической энергии вращательного движения, которое компенсирует увеличение потенциальной энергии. Общий характер движения обычно представляет собой быстрое вращение со скоростью  $\dot{\psi}$  вокруг оси волчка и медленную прецессию со скоростью  $\dot{\phi}$  этой оси относительно вертикали, сопровождающую нутацией оси относительно вертикали от  $\theta_{\max}$  до  $\theta_{\min}$ .

# ГЛАВА 4

---

## КОЛЕБАНИЯ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Колебания молекул можно рассматривать классически или методами квантовой механики. Первый подход используется в классической механике, второй — в молекулярной спектроскопии. В этой главе мы вначале приведем классическое описание с использованием сил и лагранжианов, а затем обсудим квантовомеханическую формулировку на основе гамильтонианов и уровней энергии. Сначала рассмотрим относительно небольшие молекулы, после чего перейдем к поведению бесконечных колеблющихся цепочек и колебаний твердых тел. Будут рассмотрены тепловые возбуждения колебаний, вращения молекул, инфракрасная и рамановская спектроскопия, а также дебаевская теория твердых тел.

### 2. КОЛЕБАНИЯ МОЛЕКУЛ

Наше обсуждение в этой главе основано на описании расположения соседних атомов в молекулах и твердых телах, удерживаемых на равновесных расстояниях силами упругости. Сила  $F = -k(x - x_0)$  восстанавливает равновесную длину химической связи  $x_0$  при сжатии или растяжении. Связь, естественно, обусловлена электронами, причем энергия электронной связи значительно превышает колебательную энергию при сжатии или растяжении. Мы пренебрежем влиянием этой энергии на колебания.

Молекула, состоящая из  $N$  атомов, имеет три поступательные и три вращательные степени свободы, и, следовательно,  $3N - 6$  колебательных степеней свободы. Если молекула обладает линейной структурой, то вращение относительно оси молекулы не изменяет относительное положение атомов. Поэтому учитывается только

вращение относительно двух перпендикулярных осей и, следовательно, система имеет  $3N - 5$  нормальных колебаний. У двухатомных молекул  $N = 2$ , и  $3N - 5 = 1$ , следовательно, имеется только одно нормальное колебание, связанное с движением атомов вдоль оси. Линейная трехатомная молекула ( $N = 3$ ) типа  $\text{CO}_2$  имеет четыре нормальных колебания, а нелинейная молекула  $\text{H}_2\text{O}$  — три нормальных колебания.

### 3. КОЛЕБАНИЯ ПРИ ДЕФОРМАЦИЯХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Мы применим классическое рассмотрение колебаний тела, не являющегося абсолютно твердым, к случаю небольших молекул, а затем обсудим колебания твердых тел. Однако сначала введем понятие твердого тела, выясним, что такое равновесная конфигурация тела, не являющегося абсолютно твердым, и сделаем несколько замечаний относительно жесткости реальных тел.

У абсолютно твердого тела его части находятся на фиксированном расстоянии друг от друга, так что расстояние  $r_{ij}$  между каждой парой элементов массой  $m_i$  и  $m_j$  постоянно

$$r_{ij} = (\text{const})_{ij}. \quad (1)$$

Это и есть определение твердого тела (см. гл. 3). Элементарные массы, взаимодействие между которыми обусловлено короткодействующими силами типа сил химической связи атомов в молекуле, имеют равновесную конфигурацию, удовлетворяющую условию (1). Для этой конфигурации действующие на массы обобщенные силы  $Q_i$  исчезают

$$Q_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} = 0 \quad (2)$$

и энергия минимальна. Колебания рассматриваются как движения относительно этой равновесной конфигурации твердого тела.

Практически тела не являются абсолютно твердыми, и их можно сжать и деформировать приложением сил и моментов. Для стержня модуль Юнга  $Y$  определяется как отношение напряжения к относительному удлинению, или, другими словами, как отношение приложенной силы в расчете на единицу площади поперечного сечения к удлинению, отнесенное к единице длины:

$$Y = \frac{F/A}{\Delta L/L}. \quad (3)$$

Продольные волны распространяются вдоль стержня со скоростью  $v$

$$v = (Y/\rho)^{1/2}, \quad (4)$$

где  $\rho$  — плотность, т. е. масса единицы объема. Для твердых тел модуль объемной упругости (модуль всестороннего сжатия)  $B$  обратно пропорционален сжимаемости и равен отношению изменения давления к относительному изменению объема вследствие сжатия

$$B = \frac{\Delta P}{-\Delta V/V}. \quad (5)$$

Эти модули описывают макроскопические изменения, вызванные приложенными силами. В данной главе нас будет больше интересовать движение отдельных атомов тела, чем изменения объема тела, вызванные приложенными силами.

При обсуждении колебаний мы будем предполагать, что внешние силы отсутствуют и твердое тело неподвижно, т. е. отсутствуют движение центра масс и вращение.

## 4. НОРМАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ

В этом разделе мы обсудим нормальные колебания, т. е. коллективные колебания системы, в которой большое число или все атомы колеблются с одной частотой. Для описания нормальных колебаний используются обобщенные координаты  $q_i$ , которыми могут быть, например, отклонение атома от положения равновесия или угол между химическими связями соседних атомов.

Рассмотрим смещения  $\eta_i$  обобщенных координат  $q_i$  от положения равновесия  $q_{0i}$ ,

$$q_i = q_{0i} + \eta_i. \quad (6)$$

Потенциальную энергию  $V$  можно разложить в окрестности равновесных значений обобщенных координат:

$$\begin{aligned} V(q_1, \dots, q_n) = V(q_{01}, \dots, q_{0n}) + \sum \frac{\partial V}{\partial q_i} \eta_i + \\ + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \eta_i \eta_j. \end{aligned} \quad (7)$$

Мы можем выбрать нулевую энергию таким образом, чтобы первый член  $V(q_0, \dots, q_n)$  исчез, а из условия равновесия (2) известно, что второй член также исчезает, т. е. остается только третий член

$$V(q_1, \dots, q_n) = \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \eta_i \eta_j = \frac{1}{2} V_{ij} \eta_i \eta_j, \quad (8)$$

являющийся квадратичной формой координат. Кинетическая энергия  $T$  является квадратичной формой скоростей  $\dot{q}_i = \dot{\eta}_i$ .

$$T = \frac{1}{2} \sum T_{ii} \dot{\eta}_i^2, \quad (9)$$

и лагранжиан системы  $L$

$$L = \sum \left[ \frac{1}{2} T_{ii} \dot{\eta}_i^2 - \frac{1}{2} V_{ij} \eta_i \eta_j \right] \quad (10)$$

приводит к уравнениям движения

$$T_{jj} \ddot{\eta}_j + \sum V_{ij} \eta_i = 0. \quad (11)$$

Подставим в уравнения движения функцию

$$\eta_i = \eta_{i0} e^{-i\omega t}, \quad (12)$$

которая описывает нормальные колебания с частотой  $\omega$ . Решению для  $\omega^2$  отвечает определитель, равный нулю, и мы можем записать характеристическое уравнение

$$\begin{vmatrix} V_{11} = \omega^2 T_{11} & V_{12} & \dots \\ V_{21} & V_{22} - \omega^2 T_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0. \quad (13)$$

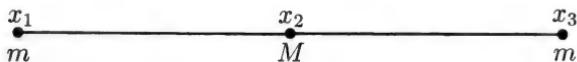
Разложение этого детерминанта приводит к уравнению относительно частот нормальных колебаний в виде полинома. Для каждой частоты  $\omega$  решается следующая система совместных уравнений для  $j = 1, 2, \dots, n$ :

$$T_{jj} \omega^2 \eta_j - \sum V_{ij} \eta_i = 0 \quad (14)$$

и находятся нормальные координаты  $\eta_i$ , соответствующие каждой частоте.

## 5. ТРЕХАТОМНАЯ МОЛЕКУЛА

Примером колебательной системы служит симметричная линейная трехатомная молекула типа  $\text{CO}_2$  с массами  $m$ , расположенными по краям при  $x_1$  и  $x_3$ , и массой  $M$ , расположенной посередине при  $x_2$ ,

Рис. 4.1. Симметричная линейная трехатомная молекула  $m$ - $M$ - $m$ .

как показано на рис. 4.1. Эта молекула обладает потенциальной и кинетической энергиями

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}C(\eta_2 - \eta_1)^2 + \frac{1}{2}C(\eta_3 - \eta_2)^2 = \\ &= \frac{1}{2}C(\eta_1^2 + 2\eta_2^2 + \eta_3^2 - 2\eta_1\eta_2 - 2\eta_2\eta_3), \end{aligned} \quad (15)$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_1^2 + \dot{\eta}_3^2) + \frac{1}{2}M\dot{\eta}_2^2, \quad (16)$$

где из соображений симметрии  $x_{03} - x_{02} = x_{02} - x_{01}$ , и  $C$  обозначает коэффициент упругости, чтобы избежать путаницы с волновым числом  $k$ . Характеристическое уравнение имеет вид

$$\begin{vmatrix} C - \omega^2 m & -C & 0 \\ -C & 2C - \omega^2 M & -C \\ 0 & -C & C - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0. \quad (17)$$

После раскрытия детерминанта и перегруппировки членов получается следующее кубическое уравнение относительно  $\omega^2$ :

$$\omega^2[C - \omega^2 m][C(M + 2m) - \omega^2 m M] = 0. \quad (18)$$

Квадратичная часть уравнения в квадратных скобках имеет по два корня. Это сохраняющие симметрию продольные нормальные колебания системы с нормальной координатой  $\zeta_1$ , и частотой  $\omega_1$

$$\begin{aligned} \zeta_1 &= \eta_2 - \eta_1, \\ \omega_1 &= (C/m)^{1/2} \end{aligned} \quad (19)$$

и асимметричные продольные колебания с параметрами

$$\begin{aligned} \zeta_2 &= (\eta_1 + \eta_3)(2m/M)^{1/2} - \eta_2(M/2m)^{1/2}, \\ \omega_2 &= (C/m)^{1/2}[1 + 2(m/M)]. \end{aligned} \quad (20)$$

Третий корень  $\omega = 0$  связан с перемещением центра масс при отсутствии колебаний. Это решение появилось в связи с нашим предположением, что нормальным колебаниям соответствуют решения, при которых атомы перемещаются только вдоль оси молекулы, а этому условию удовлетворяют только два типа колебаний. Если не ограничиваться движением атомов только вдоль оси молекулы, то



Рис. 4.2. Нормальные колебания симметричной линейной трехатомной молекулы  $m-M-m$ , представленной на рис. 4.1. Колебания с изгибом дважды вырождены, так как они происходят либо в плоскости чертежа, либо перпендикулярно этой плоскости с одинаковой частотой.

в таком случае они могут совершать поперечные колебания, уравнения становятся более сложными, а молекула может изгибаться. Движения атомов в этих трех случаях показаны на рис. 4.2. Действительно, имеются два вырожденных колебания с изгибом, происходящие под прямым углом друг к другу, которым соответствует всего четыре нормальных колебания, так как у линейной молекулы с  $N = 3$  имеется  $3N - 5 = 4$  нормальных колебаний.

Мы рассматривали симметричные трехатомные молекулы. Асимметричную, но линейную молекулу OCS можно рассмотреть аналогичным способом. Если равновесная конфигурация трехатомной молекулы изогнута, как в случае  $H_2O$ , то происходят симметричное смещение, асимметричное смещение и смещение с изгибом, как показано на рис. 4.3. Они соответствуют трем нормальным колебаниям, так как  $3N - 6 = 3$ .

## 6. ЛИНЕЙНАЯ ЦЕПОЧКА $N$ АТОМОВ

Для понимания механизма колебаний, происходящих в твердом теле, проанализируем колебания линейной цепочки из  $N$  атомов, каждый массой  $m$ , находящихся на расстоянии друг от друга  $a$ , причем каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями, с



Рис. 4.3. Три нормальных колебания нелинейной симметричной трехатомной молекулы типа H<sub>2</sub>O.

которыми его связывает пружина с упругостью  $C$ . Взаимодействием с остальными атомами пренебрежем. В равновесии атомы занимают положения  $x_n = x_{n0}$ , где

$$x_{n0} = na, \quad (21)$$

причем отсутствует как сжатие, так и растяжение пружины, и атомы могут участвовать только в продольных перемещениях. Положения атомов  $q_n$  относительно положения равновесия  $x_{n0}$

$$q_n = x_n - na \quad (22)$$

и

$$\dot{q}_n = \dot{x}_n \quad (23)$$

— скорости атомов. Расстояние между атомами  $n - 1$  и  $n$  равно

$$x_n - x_{n-1} = q_n - q_{n-1} + a \quad (24)$$

и равновесное расстояние между атомами равно  $a$ , т. е. относительное смещение соседних атомов при сжатии или растяжении равно

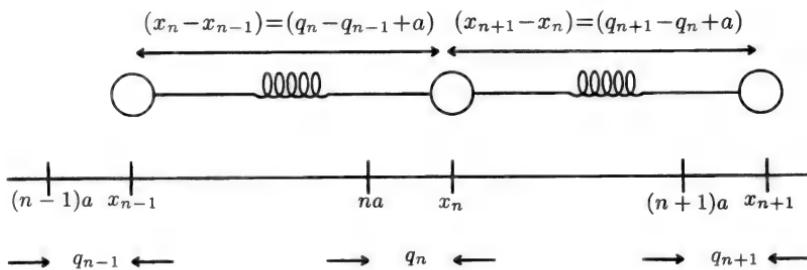


Рис. 4.4. Координаты для описания продольных колебаний линейной цепочки атомов.

$(q_n - q_{n-1})$ . Предположим, что концы цепочки закреплены и граничные условия можно записать как

$$q_0 = q_{N+1} = 0, \quad (25)$$

где индексы 0 и  $N + 1$  обозначают удаленные концы цепочки, связанные с атомами номер 1 и  $N$ , соответственно. Рассмотрим случай, представленный на рис. 4.4, на котором три атома  $n - 1$ ,  $n$  и  $n + 1$  имеют положительные относительные смещения и обе пружины деформированы. Это соответствует

$$0 < q_{n-1} < q_n < q_{n+1}. \quad (26)$$

Как видно из рисунка, на  $n$ -ю массу действует результирующая сила

$$F_{\text{рез}}^{(n)} = C(q_{n+1} - q_n) - C(q_n - q_{n-1}), \quad (27)$$

и используя уравнение движения  $F_{\text{рез}}^{(n)} = mq_n$  для  $n$ -й массы, имеем

$$q_n = \omega_0^2(q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n), \quad (28)$$

где  $C = mq^2$ .

При нормальных колебаниях все атомы совершают гармонические колебания с одной и той же частотой, так что решения можно искать в виде

$$q_n(t) = q_n^0 e^{-i\omega t}, \quad (29)$$

что дает для каждого из  $N$  атомов

$$-\omega^2 q_n^0 = \omega_0^2(q_{n+1}^0 + q_{n-1}^0 - 2q_n^0), \quad (30)$$

где  $q_n^0$  — максимальное относительное смещение  $n$ -го атома. Решение в виде бегущей волны имеет вид

$$q_{n\pm 1} = A \exp[i(n \pm 1)ka] \quad (31)$$

и аналогично для  $q_n$ , что дает

$$\omega^2 = 2\omega_0^2(1 - \cos ka). \quad (32)$$

Если использовать тригонометрическое тождество

$$(1 - \cos ka) = 2 \sin^2 \frac{1}{2}ka, \quad (33)$$

это выражение принимает вид

$$\omega = 2\omega_0 \sin \frac{1}{2}ka. \quad (34)$$

Существуют самая короткая и самая большая длины волны  $\lambda = 2\pi/k$ , отвечающие максимальной и минимальной частотам

$$\begin{aligned} \lambda_{\min} &= 2L/N & \omega_{\max} &\approx 2\omega_0 \\ \lambda_{\max} &= 2L & \omega_{\min} &\approx \pi\omega_0/N \end{aligned} \quad (35)$$

в предположении, что цепочка длинная, т. е.  $N \gg 1$ .

## 7. ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ

При больших  $N$  волновое число  $k$  можно считать непрерывной переменной, и выражение (34), где  $\omega$  фигурирует как функция  $k$ ,  $\omega(k)$ , называется дисперсионным соотношением. Из дисперсионного соотношения получается следующая зависимость фазовой скорости  $v = \omega/k$  от частоты:

$$v = \frac{a\omega}{2 \sin^{-1}(\omega/2\omega_0)} \quad (36)$$

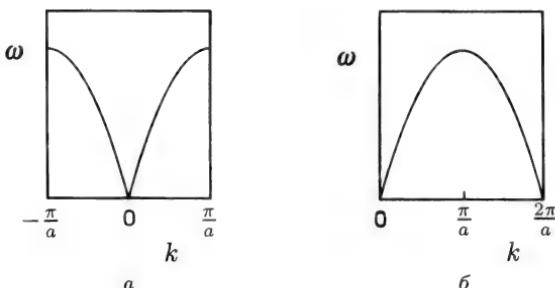


Рис. 4.5. Дисперсионное соотношение для длинной линейной цепочки атомов (а) в области  $-\pi/a < k < \pi/a$  в первой зоне Бриллюэна, и (б) — в диапазоне  $0 < k < 2\pi/a$ .

и в пределе низких частот,  $\omega \ll \omega_0$

$$v = \omega_0 a. \quad (37)$$

На рисунке 4.5 изображено дисперсионное соотношение, т. е. зависимость  $\omega$  от  $k$  (34).

Так как частоты не могут быть отрицательными, на рис. 4.5, *a* представлен график абсолютной величины  $2\omega_0 |\sin \frac{1}{2} ka|$ . Область значений  $k$  от  $-\pi/a$  до  $+\pi/a$  в физике твердого тела называется первой зоной Бриллюэна. На рис. 4.5, *b* представлена эта же зависимость, но в диапазоне изменений величины  $k$  от 0 до  $2\pi/a$ .

## 8. ДВУХАТОМНАЯ ЛИНЕЙНАЯ ЦЕПОЧКА

Приведенную модель можно распространить на случай линейной цепочки, в которой чередуются атомы малой массы  $m$  и большой массы  $M$ . Возникает два уравнения движения

$$m_n q_n = C(q_{n-1} + q_{n+1} - 2q_n), \quad (38a)$$

$$M q_{n+1} = C(q_n + q_{n+2} - 2q_{n+1}), \quad (38b)$$

где четное  $n$  относится к легкому атому, а нечетное  $n$  — к относительному смещению тяжелого атома. Оба атома колеблются с одной и той же частотой  $\omega$ , но с разными амплитудами  $q_n^0$  у малой и большой массы. Разрешенные частоты определяются следующим уравнением, квадратичным относительно  $\omega^2$ :

$$mM\omega^4 - 2C(m+M)\omega^2 + 4C^2 \sin^2 \frac{1}{2}ka = 0, \quad (39)$$

причем зависимость  $k$  от частоты показана на рис. 4.6. Спектру собственных колебаний цепочки соответствует две ветви частот: низкочастотная акустическая (или дебаевская) ветвь с граничными частотами

$$\begin{aligned} \omega^2 &\approx \left( \frac{\frac{1}{2}C}{m+M} \right) k^2 a^2 & ka &\ll \frac{1}{2}\pi \\ \omega^2 &\approx \frac{2C}{M} & ka &\approx \frac{1}{2}\pi \end{aligned} \quad (40)$$

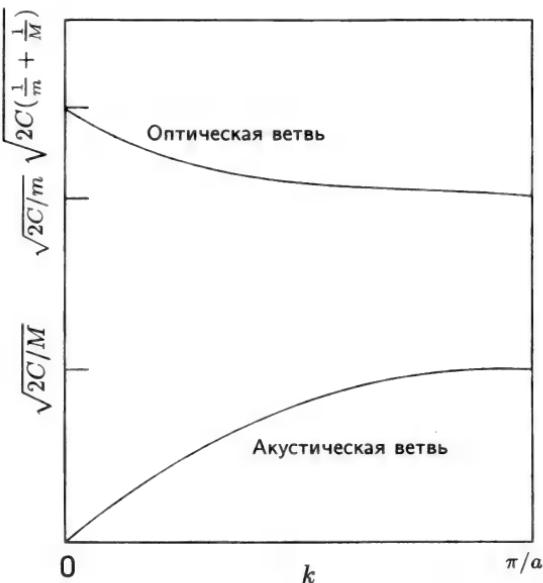


Рис. 4.6. Спектр собственных частот для оптической и акустической ветвей колебаний двухатомной линейной цепочки атомов.

и высокочастотная оптическая (или борновская) ветвь с граничными частотами

$$\begin{aligned} \omega^2 &\approx 2C \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) & ka \ll \frac{1}{2}\pi \\ \omega^2 &\approx \frac{2C}{m} & ka \approx \frac{1}{2}\pi \end{aligned} \quad (41)$$

В общем случае могут происходить продольные колебания, при которых атомы колеблются вдоль цепочки, как показано на рис. 4.4, и которые сопровождаются уменьшением и увеличением расстояний между атомами, и поперечные колебания в направлениях, перпендикулярных цепочке, как на рис. 4.7. В трехмерных кристаллах происходят как продольные, так и поперечные колебания, и каждые имеют акустическую и оптическую ветви.

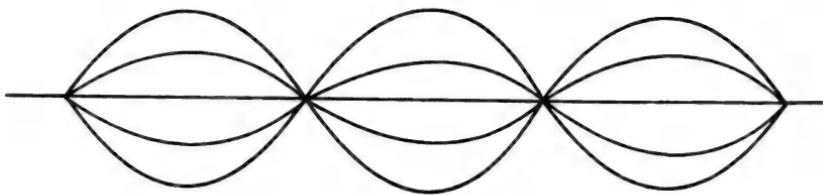


Рис. 4.7. Поперечные колебания линейной цепочки атомов.

## 9. ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Увеличение температуры твердых тел приводит к усилению колебаний решетки. При некоторой температуре  $T$  в основном возбуждены колебания, частоты которых меньше отношения  $k_B T / \hbar$ , т. е. для которых энергия фона удовлетворяет неравенству

$$\hbar\omega < k_B T. \quad (42)$$

Как видно из (35), у одномерной цепочки атомов имеются минимальная и максимальная частоты колебаний. В теории Дебая теплоемкости трехмерного твердого тела существует максимальная частота колебаний  $\omega_{\max}$ , называемая дебаевской частотой  $\omega_D$ , а связанная с ней дебаевская температура  $\Theta_D$  определяется как

$$\Theta_D = \hbar\omega_D / k_B. \quad (43)$$

При очень низких температурах возбуждается небольшое число колебаний, удельная теплоемкость растет с температурой, и в гл. 8 мы получим выражение (60)

$$C \approx \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \quad T \ll \Theta_D \quad (44)$$

для удельной молярной теплоемкости в области низких температур:  $R = N_A k_B$  – универсальная газовая постоянная. В области очень высоких температур все колебания вносят свой вклад в удельную теплоемкость, и она достигает классического предела

$$C = 3R \quad T \gg \Theta_D \quad (45)$$

не зависящего от температуры.

## 10. ВРАЩЕНИЯ МОЛЕКУЛ

Экспериментальные уровни энергии и спектроскопия вращательных и колебательных переходов молекул согласуются с результа-

тами квантовомеханического рассмотрения. Гамильтониан вращательного движения молекулы с тремя разными главными моментами инерции  $I_a \neq I_b \neq I_c$ , называемой молекулой типа асимметричного волчка, задается выражением

$$\mathcal{H} = \frac{J_a^2 \hbar^2}{2I_a} + \frac{J_b^2 \hbar^2}{2I_b} + \frac{J_c^2 \hbar^2}{2I_c}, \quad (46)$$

где  $\hbar \mathbf{J}$  — полный момент импульса.

$$J^2 = J_a^2 + J_b^2 + J_c^2. \quad (47)$$

Предположим, что молекула жесткая и у нее отсутствуют колебания. Это обоснованно, так как частота колебаний в 10–100 раз выше частоты вращений, колебательные движения усредняются и атомы могут считаться неподвижными в процессе вращения.

Для молекул, обладающих осевой симметрией, таких, как молекулы хлороформа  $\text{CHCl}_3$  или этана  $\text{C}_2\text{H}_6$ , называемых симметричным волчком,  $I_a = I_b$ , мы используем обозначения

$$I_{\parallel} = I_c \quad I_{\perp} = I_a = I_b \quad (48)$$

и, согласно, (47) гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H} = \frac{J^2 \hbar^2}{2I_{\perp}} + \frac{1}{2} J_a^2 \hbar^2 \left( \frac{1}{I_{\parallel}} - \frac{1}{I_{\perp}} \right). \quad (49)$$

Энергии задаются выражением

$$E_{JK} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I_{\perp}} + \frac{1}{2} \hbar^2 K^2 \left( \frac{1}{I_{\parallel}} - \frac{1}{I_{\perp}} \right), \quad (50)$$

где  $K$  — еще одно квантовое число дополнительно к квантовому числу  $J$ . Это весьма сложная система, и из педагогических соображений мы ограничимся более подробным обсуждением двухатомной молекулы.

В двухатомной, или линейной молекуле, почти вся масса сосредоточена в ядрах, расположенных на оси, так что вращения вокруг этой оси симметрии связаны только с вращением электронов, но не ядер, и мы не будем принимать его во внимание. Результирующий гамильтониан вращательного движения вокруг перпендикулярной оси

$$\mathcal{H} = \frac{J^2 \hbar^2}{2I_{\perp}} \quad (51)$$

приводит к следующему уравнению Шредингера в сферических координатах:

$$\frac{\hbar^2}{2I_{\perp}} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right\} = E\Psi, \quad (52)$$

которое имеет решение

$$E_J = BJ(J+1), \quad (53)$$

где

$$B = \hbar^2/2I_{\perp}. \quad (54)$$

Таким образом, вращательные состояния квантуются и их энергии определяются выражением (53). Если принять во внимание центробежное возмущение, обусловленное увеличением расстояния между ядрами вследствие действия возникающих при вращении центробежных сил, то возникает небольшая поправка к энергии

$$E_J = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2, \quad (55)$$

где  $D \ll B$ . Разность энергий  $\Delta E$  между двумя последовательными вращательными уровнями  $J$  и  $J+1$

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{J+1} - E_J = \\ &= 2B(J+1) - 4D(J+1)^3. \end{aligned} \quad (56)$$

Правила отбора для разрешенных переходов между вращательными уровнями имеют вид

$$\Delta J = \pm 1, \quad \Delta M = \pm 1, \quad (57)$$

хотя энергия непосредственно не зависит от  $M$ .

Частоты  $\omega = \Delta E/\hbar$  переходов между вращательными уровнями молекулы согласно (56), попадают в микроволновую область электромагнитного спектра, обычно в диапазоне от  $10^{10}$  до  $10^{11}$  Гц. Их можно измерить путем непосредственного поглощения микроволнового излучения, подчиняющегося правилам отбора (57).

## 11. КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОЛЕКУЛ

Первоначальное обсуждение в этой главе частот колебаний  $\omega$  было основано на классической механике. Квантовомеханическое рассмотрение с использованием гамильтониана

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (58)$$

дает для энергий колебаний

$$E = \hbar\omega \left( n_{\nu} + \frac{1}{2} \right), \quad (59)$$

где  $n_{\nu} = 0, 1, 2 \dots$  — колебательное квантовое число, и каждому нормальному колебанию соответствует своя основная частота  $\omega$ . В

колебательной спектроскопии измеряют переходы между уровнями энергии (59), для которых  $\Delta n_\nu = \pm 1$ .

Молекулярные колебания соответствуют инфракрасной области спектра обычно в диапазоне частот от  $10^{12}$  до  $10^{14}$  Гц. При колебательном переходе, вызванном поглощением инфракрасного излучения, должно происходить изменение электрического дипольного момента  $p_{\text{дип}}$  молекулы. У линейной молекулы  $\text{CO}_2$  с положительно заряженным атомом углерода в центре и отрицательно заряженными атомами кислорода на краях дипольный момент отсутствует, пока атомы занимают положения равновесия. Из рис. 4.2 видно, что при асимметричных продольных колебаниях возникает дипольный момент, направленный вдоль оси молекулы  $\text{CO}_2$ , а при поперечных колебаниях возникает дипольный момент в направлении, перпендикулярном этой оси. Из рисунка также ясно, что дипольный момент не возникает при симметричных смещениях. Асимметричные смещения и поперечные колебания можно зарегистрировать по изменению дипольного момента, и таким образом они активны в инфракрасной области. Симметричные продольные колебания нельзя обнаружить подобным образом, и они не активны в инфракрасной области.

В этом случае зарегистрировать колебательные переходы удается с помощью комбинационного рассеяния света, или рамановской спектроскопии. Фотон в оптической области спектра поглощается молекулой, которая затем испускает другой фотон, причем разность их частот  $\hbar\omega$  равна частоте колебательного перехода  $\hbar\omega_{\text{кол}}$ . Отсюда

$$\omega_{\text{кол}} = |\omega_{\text{пад}} - \omega_{\text{излуч}}|, \quad (60)$$

где  $\omega_{\text{кол}} \ll \omega_{\text{пад}}, \omega_{\text{излуч}}$ . Чтобы это произошло, должна измениться поляризуемость  $\alpha$ , вызванная электрическим полем падающего фотона  $E$ , т. е. у молекулы должен индуцироваться электрический дипольный момент  $p_{\text{инд}}$

$$p_{\text{инд}} = \alpha E. \quad (61)$$

Симметричные продольные колебания сопровождаются подобными изменениями поляризуемости, и, следовательно, они раманактивны.

Многие большие молекулы содержат небольшие молекулярные группы, такие, как амино ( $\text{H}_2\text{N}-$ ), циано ( $\text{NC}-$ ), формил ( $\text{HCO}-$ ), гидроксил ( $\text{HO}-$ ), имино ( $\text{HN}=$ ), метил ( $\text{H}_3\text{C}-$ ), метилен ( $\text{H}_2\text{C}=$ ), нитро ( $\text{O}_2\text{N}-$ ), нитрозо ( $\text{ON}-$ ), и фосфо ( $\text{O}_3\text{P}-$ ). Им

отвечают характерные частоты нормальных колебаний, в которых остальная часть молекул не принимает активного участия. Поэтому присутствие этих групп может быть обнаружено в колебательном спектре, и кроме того, дополнительные характеристики молекулярного окружения этих групп могут быть получены из небольших смещений частот их колебаний. В результате этого инфракрасная и рамановская спектроскопии стали основным средством анализа для химиков-органиков.

# ГЛАВА 5

---

## КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 2 мы обсуждали формализмы с использованием лагранжиана и гамильтониана. Координаты и канонические импульсы, входящие в гамильтониан, были определены на основе координат и скоростей в лагранжиане. В этой главе мы покажем, как преобразование координат и импульсов позволяет упростить решения задач механики. Приводятся примеры преобразования гамильтонианов и различные подходы к рассмотрению механических систем, таких, например, как гармонический осциллятор. В этой главе описаны используемые в механике подходы, основанные на уравнении Гамильтона—Якоби, переменных действие—угол, скобках Пуассона.

### 2. КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Каноническое преобразование заключается в переходе в фазовом пространстве от исходных координат и канонических импульсов  $q_i, p_i$ , к новым переменным  $Q_i, P_i$ . Оно сохраняет форму уравнений Гамильтона и производит аддитивные преобразования гамильтониана, переводя его из начальной формы  $\mathcal{H}(q_i, p_i, t)$  к новому виду  $K(Q_i, P_i, t)$ . Производящая функция  $F(q, Q, t)$  совершает преобразование

$$\sum p_i \dot{q}_i - \mathcal{H} = \sum P_i \dot{Q}_i - K + \frac{dF}{dt}, \quad (1)$$

сохраняя при этом уравнения Гамильтона

$$\left. \begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} & \dot{Q}_i &= \frac{\partial K}{\partial P_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} & \dot{P}_i &= -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \end{aligned} \right\}, \quad (2)$$

$$K = \mathcal{H} + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (3)$$

Дифференцируя производящую функцию  $F$  [обозначается как  $F_1(q_i, Q_i, t)$ ], можно, в частности, получить как старые, так и новые канонические импульсы

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}. \quad (4)$$

Формулы (1) и (3) связаны друг другом соотношениями (4). Производящая функция  $F_j$  в общем случае зависит от одной старой и одной новой переменной в фазовом пространстве, и так как имеется две старые переменные  $q$  и  $p$ , и соответственно две новые  $Q$  и  $P$ , то всего имеется четыре следующие производящие функции:

$$F = F_1(q, Q, t), \quad (5a)$$

$$F = F_2(q, P, t) - \sum Q_i P_i, \quad (5b)$$

$$F = F_3(p, Q, t) + \sum q_i p_i, \quad (5v)$$

$$F = F_4(p, P, t) + \sum q_i p_i - \sum Q_i P_i. \quad (5g)$$

Соотношения (4) демонстрируют способ получения с помощью частных производных от производящей функции соответствующей переменной фазового пространства. Другим примером служат соотношения

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = -\frac{\partial F_2}{\partial P_i}. \quad (6)$$

В данном случае производящая функция  $F_1 = q_i Q_i$  осуществляет замену координат на импульсы, т. е.  $p_i = Q_i$ ,  $q_i = -P_i$ , тогда как производящая функция  $F_2 = q_i P_i$  совершает тождественное преобразование  $q_i = Q_i$  и  $p_i = P_i$ .

### 3. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Используя каноническое преобразование с производящей функцией  $F_1$ , можно установить интересную особенность гармонического осциллятора:

$$F_1(q, Q) = \frac{1}{2} m \omega q^2 \operatorname{ctg} Q. \quad (7)$$

При этом гамильтониан одномерного гармонического осциллятора

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} \quad (8)$$

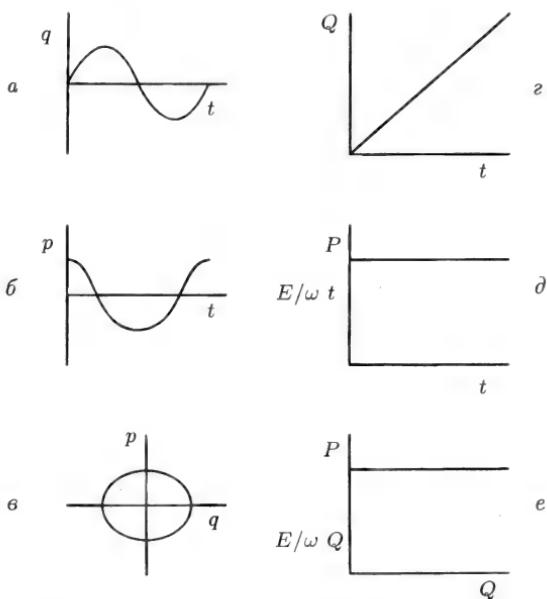


Рис. 5.1. Зависимость от времени координаты  $q$  (а) и импульса  $p$  (б) простого гармонического осциллятора с гамильтонианом (8). На рис. в изображена фазовая диаграмма  $p$ — $q$ . Соответствующие графики в преобразованной системе координат, полученные с использованием производящей функции  $F_1(q, Q)$  по уравнению (7), представлены на рис.  $z$ ,  $\delta$ ,  $e$ .

с  $k = m\omega^2$  преобразуется в новый гамильтониан

$$K = \omega P, \quad (9)$$

где новый импульс  $P = E/\omega$  оказывается постоянным,  $E$  — энергия, а новая координата  $Q$  линейно зависит от времени

$$Q = \omega t + \delta. \quad (10)$$

Этот подход приводит к следующей зависимости исходных координаты и импульса от времени:

$$q = (2E/m\omega^2)^{1/2} \sin(\omega t + \delta), \quad (11)$$

$$p = (2mE)^{1/2} \cos(\omega t + \delta). \quad (12)$$

Приведенные выражения, безусловно, легче получить, используя элементарные методы. Графики, соответствующие выражениям (9)–(12) на рис. 5.1, иллюстрируют оба способа описания характера движения простого гармонического осциллятора.

#### 4. УРАВНЕНИЕ ГАМИЛЬТОНА—ЯКОБИ

Уравнение Гамильтона—Якоби получается при использовании производящей функции  $F_1(q, P, t)$  для канонического преобразования в систему, где новый гамильтониан тождественно равен нулю:  $K = 0$ . Из (2) видно, что в новой системе производные по времени от координат и импульсов исчезают, т. е.  $\dot{Q}_i = 0$  и  $\dot{P}_i = 0$ , и, следовательно, новые координаты и импульсы являются интегралами движения, которые обозначим соответственно как  $\alpha_i$  и  $\beta_i$ .

$$\begin{aligned} P_I &= \alpha_i, \\ Q_I &= \beta_i. \end{aligned} \quad (13)$$

Выражение для  $p_i$  (6)

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \quad (14)$$

можно подставить в гамильтониан  $\mathcal{H}(q_i, p_i, t)$  (3), что приводит к уравнению Гамильтона—Якоби

$$\mathcal{H}\left(q_i, \frac{\partial S^*}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial S^*}{\partial t} = 0, \quad (15)$$

где мы, как принято, записали  $S^*$  вместо  $F_2$  в так называемой главной функции Гамильтона. Если, как это часто бывает, гамильтониан не зависит явно от времени, то можно написать

$$S^*(q_i, \alpha_i, t) = S(q_i, \alpha_i) - Et, \quad (16)$$

и уравнение Гамильтона—Якоби приобретает не зависящий от времени вид

$$\mathcal{H}\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = E, \quad (17)$$

где  $S(q_i, \alpha_i)$  называют характеристической функцией Гамильтона, а постоянная  $E$  представляет собой полную энергию системы.

В качестве примера запишем уравнение Гамильтона—Якоби для одномерного гармонического осциллятора (8)

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 = E. \quad (18)$$

Интеграл от главной функции Гамильтона имеет простой вид

$$S^* = (2m)^{1/2} \int [E - \frac{1}{2} m\omega^2 q^2] dq - Et. \quad (19)$$

Из этого выражения мы можем получить соответственно формулы (11) и (12), характеризующие зависимость от времени исходных координат  $q$  и импульса  $p$  (см. *Goldstein*, 1980, р. 443–444).

## 5. СЛУЧАЙ ПЕРЕМЕННЫХ ДЕЙСТВИЕ—УГОЛ

Периодические движения можно рассмотреть с использованием производящей функции  $F_2(q, P)$ . В этом случае преобразованный импульс  $P$  обычно называется действием  $J$  и определяется интегралом

$$P = J = \oint pdq \quad (20)$$

по замкнутой области фазового пространства. Этот интеграл представляет собой площадь, ограниченную кривыми  $q, p$  в двумерном фазовом пространстве, и постоянен во времени. Он имеет размерность момента импульса. Переменная  $Q$ , сопряженная  $J$ , называется угловой переменной и обозначается  $w$ ,

$$Q = w = \frac{\partial}{\partial J} F_2(q, P). \quad (21)$$

Гамильтониан  $\mathcal{H}(J)$  зависит только от  $J$ , так что уравнение Гамильтона имеет вид

$$\dot{w} = \frac{\partial}{\partial J} \mathcal{H}(J) = \nu(J), \quad (22)$$

где  $\nu$  — частота, зависящая только от  $J$ , и уравнение (22) имеет непосредственное решение

$$w = \nu t + \beta, \quad (23)$$

где  $\beta$  — фазовая постоянная.

Можно показать, что угловая переменная  $w$  изменяется на единицу

$$\Delta w = 1 = \nu \tau \quad (24)$$

за время  $\tau$ , являющееся периодом изменения  $q$ , а это означает, что  $\nu = 1/\tau$  — величина, обратная периоду. Преимущество этого метода состоит в том, что он дает частоту периодического движения без необходимости решения проблемы.

Примером целесообразного подхода, основанного на использовании переменных действие—угол, является случай одномерного гармонического осциллятора, гамильтониан которого (8) можно записать в виде

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = E. \quad (25)$$

Переменную действия  $J$

$$J = (2m)^{1/2} \oint \left[ E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right] dq \quad (26)$$

можно определить непосредственно интегрированием, что дает

$$J = \frac{2\pi E}{\omega}, \quad (27)$$

так что

$$E = \mathcal{H} = \frac{J\omega}{2\pi} \quad (28)$$

и

$$\nu = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial J} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}(k/m)^{1/2}. \quad (29)$$

В результате получаем

$$q = (J/\pi m\omega)^{1/2} \sin 2\pi w, \quad (30)$$

$$p = (mJ\omega/\pi)^{1/2} \cos 2\pi w. \quad (31)$$

В соответствии с формулами (23) и (28) полученные результаты согласуются с ранее известными из формул (11) и (12) с  $\delta = 2\pi\beta$ .

## 6. СКОБКИ ПУАССОНА

Еще один из используемых в механике методов основан на скобках Пуассона. Скобки Пуассона двух функций  $u, v$  и сопряженных канонических переменных  $q_i, p_i$  определяются как

$$[u, v] = \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} \quad (32)$$

Легко показать, что

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad (33)$$

$$[q_i, p_j] = -[p_i, q_j] = \delta_{ij}. \quad (34)$$

Уравнение движения для случая функции  $f$ , записанное с помощью скобок Пуассона, имеет вид

$$\frac{df}{dt} = [f, \mathcal{H}] + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (35)$$

где  $\mathcal{H}$  — гамильтониан. В частности, для координаты  $x$

$$v_x = \dot{x} = [x, \mathcal{H}]. \quad (36)$$

Скобки Пуассона являются классическим аналогом коммутаторов в квантовой механике.

Можно показать, что для моментов импульса  $L_i$

$$[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} L_k, \quad (37)$$

$$[p_i, L_j] = p_k, \quad (38)$$

где безразмерные коэффициенты Леви—Чивита  $\varepsilon_{ijk}$  равны нулю, если любые два индекса совпадают;  $+1$  — для случая циклической перестановки индексов  $ijk$  и  $-1$  — для случая нециклической перестановки. Таким образом, например

$$\begin{aligned}\varepsilon_{123} &= \varepsilon_{231} = +1, \\ \varepsilon_{213} &= \varepsilon_{132} = -1, \\ \varepsilon_{113} &= \varepsilon_{232} = 0.\end{aligned}\tag{39}$$

Коэффициенты Леви—Чивита также называют перестановочными коэффициентами, тензором перестановок или изотропным тензором третьего ранга.

# ГЛАВА 6

---

## НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА И ХАОС

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Выше мы уже рассматривали интегрируемые задачи, в случае которых можно проинтегрировать уравнения движения и получить решения в квадратурах. Для задачи двух тел, взаимодействующих обратно пропорционально квадрату расстояния между ними, решения описывают движение по эллиптическим, параболическим и гиперболическим траекториям, причем лишь первые представляют собой замкнутые орбиты. Однако даже в задаче двух тел существует множество потенциалов взаимодействия, для которых уравнения движения не интегрируются. В этой главе мы исследуем, что происходит с системой при отсутствии регулярных решений. Начнем рассмотрение со случаев, когда неинтегрируемость уравнений движения возникает из-за возмущений основных взаимодействий, и покажем, что траектории движения при малых возмущениях остаются близки к исходным. Однако при достаточно сильных возмущениях движение может стать хаотическим. Далее мы обсудим некоторые характерные особенности возникающего хаоса и даже определим области, в пределах которых системы ведут себя «нормально» среди окружающего хаоса. Мы рассмотрим также логистическое уравнение и ряд других физических и математических систем, эволюция которых демонстрирует возникновение хаотического поведения.

### 2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Теория возмущений часто используется в задачах, где основное взаимодействие соответствует интегрируемому гамильтониану  $\mathcal{H}_0(p, q)$ , для которого решение известно, а дополнительное взаимо-

действие можно учесть, добавив член  $\Delta\mathcal{H}(p, q)$  в полный гамильтониан системы  $\mathcal{H}(p, q)$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \Delta\mathcal{H}. \quad (1)$$

Обычный способ решения связан с использованием производящей функции  $S(q, P_0, t) = F_2(q, P, t)$ , которая преобразует основной гамильтониан  $\mathcal{H}_0(p, q)$ . При этом координаты фазового пространства  $p$  и  $q$  преобразуются в новые координаты  $P_0$  и  $Q_0$  гамильтониана  $K_0(Q, P)$ , который тождественно равен нулю:

$$K_0(Q_0, P_0) = 0 \quad (2)$$

аналогично подходу Гамильтона—Якоби. Уравнения Гамильтона

$$\frac{\partial K}{\partial P_0} = \dot{Q}_0 \quad \frac{\partial K}{\partial Q_0} = -\dot{P}_0 \quad (3)$$

для  $K = 0$  дают новые координаты и импульсы  $Q_0$  и  $P_0$ , которые являются интегралами движения

$$Q = Q_0 \quad P = P_0. \quad (4)$$

Индексы указывают, что эти постоянные относятся к гамильтониану нулевого порядка без учета возмущения  $\Delta\mathcal{H}$ .

Применяя аналогичное преобразование к полному гамильтониану

$$\mathcal{H}(P_0, Q_0) = \mathcal{H}_0(P_0, Q_0) + \Delta\mathcal{H}(P_0, Q_0), \quad (5)$$

мы получим преобразованный гамильтониан  $\Delta K_0(P_1, Q_1)$ , который можно использовать для нахождения поправок первого порядка к производным по времени от координат и импульсов

$$\frac{\partial \Delta K_0}{\partial P_1} = \dot{Q}_1 \quad \frac{\partial \Delta K_0}{\partial Q_1} = -\dot{P}_1. \quad (6)$$

Эти выражения можно проинтегрировать, что дает первое приближение для  $Q_1$  и  $P_1$

$$Q_1 = \int \frac{\partial \Delta K_0}{\partial P} dt, \quad (7)$$

$$P_1 = - \int \frac{\partial \Delta K_0}{\partial Q} dt. \quad (8)$$

В результате мы получаем новую производящую функцию  $S(Q_0, P_1, t)$  и, следовательно, новый возмущенный гамильтониан  $\Delta K_1(Q_2, P_2)$ , который можно использовать для нахождения величин  $Q_2$  и  $P_2$  в следующем порядке. Процесс представляет собой систематическую итерационную процедуру вычисления все более точных приближений к решению, если известен вид возмущения  $\Delta\mathcal{H}$ .

### 3. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В гл. 1 было показано, как циклические координаты можно связать с сопряженными импульсами, которые представляют собой интегралы движения. Если ни одна из координат не является циклической, то можно применить одно или последовательность канонических преобразований к новым переменным  $Q_i$ , являющимся циклическими, в результате чего гамильтониан примет вид  $\mathcal{H}(P_1, P_2, \dots, P_N)$ . Сначала мы рассмотрим только невозмущенные системы, а затем обсудим результат введения возмущения. Для преобразованного к циклическим переменным гамильтониана уравнения Гамильтона

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i}, \quad (9)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i} \quad (10)$$

имеют решения для всех  $N$  переменных

$$Q_i(t) = \omega_i t + Q_i(0), \quad (11)$$

$$P_i(t) = P_i(0) + E_i/\omega_i, \quad (12)$$

где принято  $P_1(0) = 0$ , а  $E_i$  — сохраняющаяся энергия.

Пока мы рассматриваем случай  $N = 1$ , а в следующем разделе перейдем к обсуждению более высоких значений  $N$ . При  $N = 1$  решение для гармонического осциллятора было получено выше [гл. 5, формулы (11) и (12)]. Используя уравнение (9) из гл. 5, мы можем сразу записать хорошо известные выражения для исходных переменных  $p'$  и  $q'$ :

$$q' = (2P/m\omega)^{1/2} \sin \omega t, \quad (13)$$

$$p' = (2mP\omega)^{1/2} \cos \omega t. \quad (14)$$

Движение в плоскости  $q', p'$  ограничено эллипсом, а движение в системе безразмерных нормированных координат  $q$  и  $p$ , имеющих вид

$$q = q'/(2P/m\omega)^{1/2} \quad p = p'/(2mP\omega)^{1/2}, \quad (15)$$

представляет собой равномерное вращение по окружности единичного радиуса.

#### 4. ТРАЕКТОРИИ СИСТЕМЫ НА $N$ -МЕРНОМ ТОРЕ

При  $N = 2$  в четырехмерном фазовом пространстве  $(q_1, p_1, q_2, p_2)$  существует два простых гармонических решения. Для нормированных переменных первому решению соответствует вращение по окружности в плоскости  $(q_1, p_1)$ , а второму — в плоскости  $(q_2, p_2)$ . Для наглядности будем считать, что радиус первой окружности больше, а частота вращения по ней  $\omega_1$  меньше, чем соответствующая частота другого осциллятора. Движение в плоскости  $(q_2, p_2)$  соответствует вращению по окружности, центр которой перемещается вдоль первой окружности и которая ориентирована под прямым углом относительно первой. Таким образом, траектория движения всей системы в целом представляет собой спираль, которая как бы «навивается» на окружность в плоскости  $(q_1, p_1)$  (рис. 6.1).

Если частота  $\omega_2$  кратна  $\omega_1$ , то точка, изображающая систему, воспроизводит одну и ту же спираль, образуя замкнутую траекторию. Если отношение  $\omega_2/\omega_1$  является рациональной дробью, т. е. отношением целых чисел, то траектория остается замкнутой, но при этом образует несколько спиралей вокруг исходной окружности в плоскости  $(q_1, p_1)$ . Таким образом, соизмеримость частот приводит к замкнутым траекториям. Однако если частоты несоизмеримы, т. е. их отношение  $\omega_2/\omega_1$  выражается иррациональным числом, то спираль будет покрывать поверхность тора, никогда не проходя

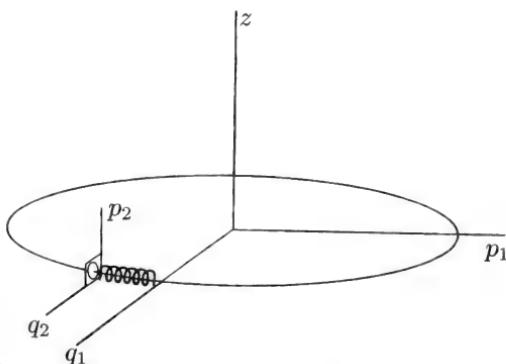


Рис. 6.1. Траектория точки, изображающей систему двух гармонических осцилляторов, в фазовом пространстве  $(p_1, q_1$  и  $p_2, q_2)$  для случая  $\omega_1 \ll \omega_2$ . Движение системы в целом описывается образующей тор спиралью, навитой на окружность, которая соответствует траектории первого осциллятора.

дважды через одну и ту же точку (однако в конечном счете она будет проходить сколь угодно близко к каждой из точек на поверхности тора). Таким образом, мы получаем финитную траекторию, ограниченную поверхностью тора, но не являющуюся замкнутой.

Предложенный анализ легко обобщается на случай  $N = 3$ , при котором траектория движения ограничена трехмерной поверхностью, называемой трехмерным тором в шестимерном фазовом пространстве переменных  $q_1, q_2, q_3, p_1, p_2, p_3$ . Для больших значений  $N$  аналогично получим  $N$ -мерный тор в  $2N$ -мерном фазовом пространстве.

## 5. УСТОЙЧИВОСТЬ ВОЗМУЩЕННЫХ ТРАЕКТОРИЙ И ПЕРЕХОД К ХАОСУ

Рассмотрим интегрируемую механическую систему, которая при наложении небольшого возмущения перестает быть интегрируемой. При этом возникает вопрос, будет ли возмущенное решение устойчивым и останутся ли траектории системы близки к невозмущенным достаточно долго. Теорема Колмогорова—Арнольда—Мозера (так называемая КАМ-теорема) утверждает, что если вызывающее неинтегрируемость возмущение достаточно мало (а) и частоты  $\omega_i$  невозмущенного движения некоррелированы (б), то движение системы будет ограничено поверхностью  $N$ -мерного тора и возмущенные траектории останутся устойчивыми и локализованными в той же области, что и невозмущенные. Теорема также утверждает, что в случае  $N > 2$  может существовать сколь угодно малый набор начальных условий, приводящих к блужданию системы по энергетической поверхности.  $N$ -мерные торы называют также КАМ-торами или КАМ-кривыми (при изображении сечений поверхности).

КАМ-теорема применима лишь в случае малых возмущений. При достаточно больших возмущениях поведение системы может стать хаотическим, для которого последовательные траектории могут все больше удаляться от невозмущенных. Степень удаления может фактически экспоненциально нарастать с числом итераций. Рассмотрим эти области возникновения хаотического поведения.

Примером резкого различия между линейным и хаотическим движениями может служить турбулентность потока воды. При ламинарном течении две соседние частицы жидкости достаточно долго остаются вблизи друг друга, но при возникновении турбулентности те же частицы могут быстро удаляться друг от друга. Другим примером может служить движение космического корабля на

околоземной орбите. Кратковременным включением ракетного двигателя можно слегка изменить орбиту, тогда как мощный импульс позволяет резко изменить орбиту или даже направить корабль в космическое пространство.

Хаотические явления характеризуются тремя основными свойствами, включая перемешивание тесно расположенных периодических орбит и чувствительность к начальным условиям.

1. Перемешивание в фазовом пространстве означает, что если мы выделим два произвольно малых интервала (или области)  $I_1$  и  $I_2$ , то орбита, начавшаяся в области  $I_1$ , рано или поздно пройдет через область  $I_2$ . Выше уже говорилось о том, что несоизмеримые орбиты проходят сколь угодно близко к любой точке на поверхности тора.
2. Плотные периодические орбиты — это орбиты, многократно проходящие очень близко к одной и той же области. Например, Луна движется вокруг Земли почти по одной и той же орбите, несмотря на возмущения, вызываемые Солнцем и другими планетами.
3. Чувствительность системы к начальным условиям можно, например, охарактеризовать скоростью, с которой следующие друг за другом орбиты расходятся на поверхности тора.

## 6. ЛОГИСТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ИЛИ КВАДРАТИЧНЫЙ ИТЕРАТОР

Для понимания природы хаоса полезно проанализировать простой математический пример, демонстрирующий как регулярность обычного повторяющегося поведения системы, так и нарушения регулярности при хаотическом поведении. В качестве такого примера можно использовать логистическое уравнение, которое иногда называют квадратичным итератором

$$x_{n+1} = ax_n(1 - x_n) \quad (16)$$

в интервале

$$0 \leq x \leq 1 \quad (17)$$

при положительном управляющем параметре  $a$ . Поведение итераций этого уравнения изменяется от сходимости к хаотическому раз-

**Таблица 6.1.** Сходимость итераций  $x_n$  логистического уравнения для трех различных начальных значений  $x_0$  при управляющем параметре  $a = 2$ .

$n$	$x_n$	$n$	$x_n$	$n$	$x_n$
0	0,2000	0	0,3000	0	0,9000
1	0,3200	1	0,4200	1	0,1800
2	0,4352	2	0,4872	2	0,2952
3	0,4916	3	0,4997	3	0,4161
4	0,4999	4	0,5000	4	0,4899
5	0,5000	5	0,5000	5	0,4996
.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.
25	0,5000	25	0,5000	25	0,5

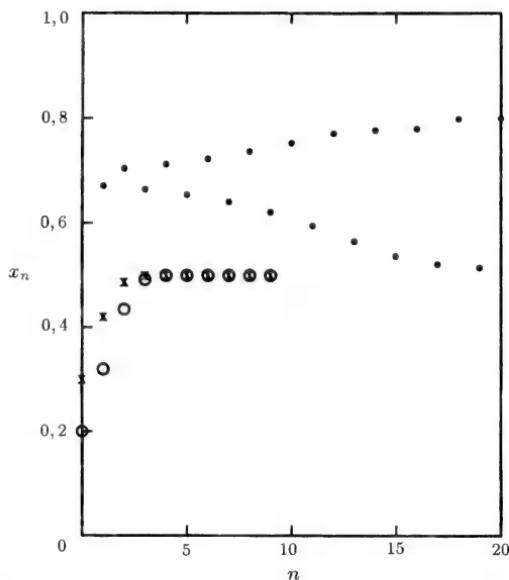
бросу вблизи значения  $a = 3,67$ , вследствие чего обычно это уравнение исследуют в области значений управляющего параметра

$$0 \leq a \leq 4. \quad (18)$$

Чтобы продемонстрировать, как итерации уравнения сходятся к единому решению  $x_\infty$  (при котором  $x_{n+1} = x_n$  независимо от начального значения  $x_0$ ) при  $n \rightarrow \infty$ , рассмотрим случай  $a = 2$  с тремя различными начальными значениями  $x_0 = 0,2000, 0,3000$  и  $0,9000$ , результаты последовательных итераций для которых приведены в табл. 6.1. Кроме того, результаты для двух из них представлены на рис. 6.2. Действительно, для всех начальных значений  $x$  в интервале (17) последовательные итерации при больших  $n$  сходятся к одному и тому же значению  $x_n = 0,5$ , т. е. значения  $x_{n+1}$  при последовательных итерациях стремятся к величине  $x_\infty = 0,5$ . Это предельное значение  $x_\infty$  при  $n \rightarrow \infty$  называют аттрактором.

Для демонстрации возможности существования значительно большего числа решений возьмем в качестве управляющего параметра величину  $a = 3,2$  и проследим поведение итераций при предыдущем начальном значении  $x_0 = 0,3000$ . Последовательные итерации приведены в табл. 6.2 и на рис. 6.2. Легко заметить, что в этом случае сходимость оказывается значительно более медленной и после достаточно большого числа итераций величины  $x$  чередуются между двумя значениями аттрактора

$$\begin{aligned} x_n &= 0,5141, \\ x_{n+1} &= 0,7994. \end{aligned} \quad (19)$$



**Рис. 6.2.** Значения  $x_n$ , получаемые при последовательных итерациях логистического уравнения (с циклом  $N = 1$  и управляемым параметром  $a = 2$ ) для начальных значений  $x_0 = 0,2$  (o) и  $0,3$  (x), а также для начального значения  $x_0 = 0,3$  (•) с циклом  $N = 2$  и управляемым параметром  $a = 3,2$ . Можно отметить быструю сходимость цикла с  $N = 1$  и значительно более медленную сходимость цикла с  $N = 2$ .

**Таблица 6.2.** Сходимость последовательных итераций логистического уравнения (16) к двум различным пределам  $x = 0,5131$  и  $x = 0,7994$  при значении управляемого параметра  $a = 3,2$ .

$n$	$x_n$	$n$	$x_n$
0	0,3000	11	0,5950
1	0,6720	12	0,7711
2	0,7053	13	0,5647
3	0,6651	14	0,7866
4	0,7128	15	0,5372
5	0,6551		.
6	0,7230		.
7	0,6408		.
8	0,7365	24	0,7994
9	0,6210	25	0,5131
10	0,7531		

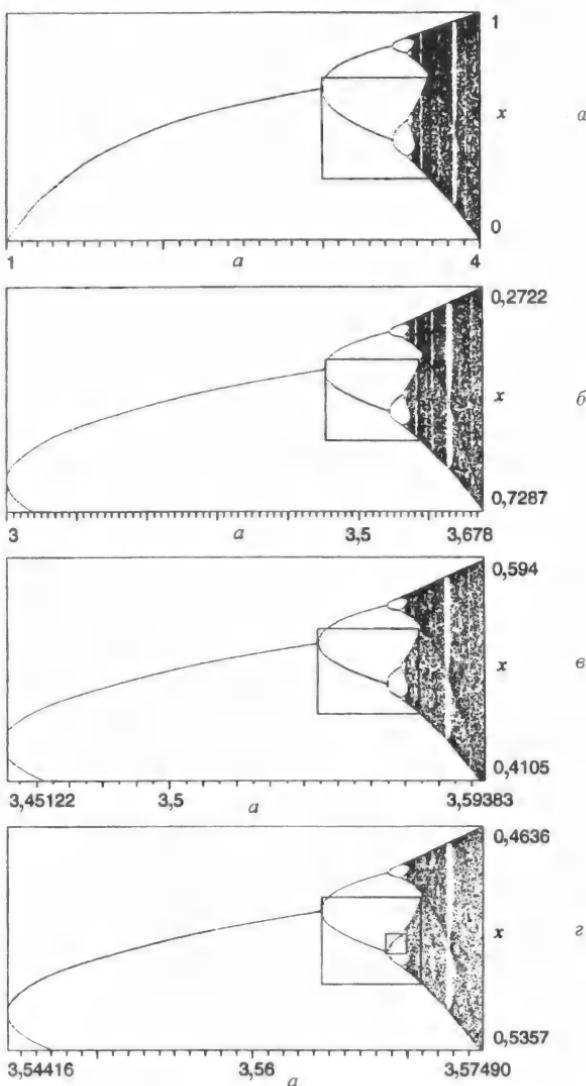


Рис. 6.3. Диаграммы Фейгенбаума (зависимость  $x$  от  $a$ ) для логистического уравнения в диапазоне значений  $1 \leq a \leq 4$  и  $0 \leq x \leq 1$  (a). На рис. б-г показаны участки этой диаграммы в увеличенном масштабе для первой ( $\Delta a = 0,68$ ,  $\Delta x = 0,46$ ), второй ( $\Delta a = 0,14$ ,  $\Delta x = 0,18$ ) и третьей ( $\Delta a = 0,03$ ,  $\Delta x = 0,07$ ) бифуркаций. (Из книги: Peitgen O. et al., Chaos and Fractals, Springer-Verlag, Berlin, 1992, p. 589.)

Легко показать, что при значении управляющего параметра  $a = 3,5$  возникает четырехкратный цикл с четырьмя аттракторами

$$\begin{aligned}x_n &= 0,501, \\x_{n+1} &= 0,875, \\x_{n+2} &= 0,383, \\x_{n+3} &= 0,827.\end{aligned}\tag{20}$$

При значениях  $a$ , равных 3,55 и 3,567, возникают восьмикратный и шестнадцатикратный циклы.

На рис. 6.3 показана последовательность так называемых диаграмм Фейгенбаума, представляющих собой зависимость предельного значения  $x_n$  (при  $n \rightarrow \infty$ ) от управляющего параметра  $a$ . Из диаграмм видно, что с ростом  $a$  система испытывает последовательные бифуркации, при каждой из которых число решений логистического уравнения удваивается. Процесс удвоения числа решений продолжается до тех пор, пока значение управляющего параметра  $a$  не достигнет критической величины  $a_\infty \sim 3,5699$  (возникающая при этом ситуация более подробно рассматривается в следующем разделе). При значениях  $a$ , превышающих это критическое значение  $a_\infty$ , поведение системы становится хаотическим, т. е. генерируемые значения  $x_n$  становятся похожи на последовательность случайных чисел. Достаточно взять в качестве управляющего па-

**Таблица 6.3.** Генерация случайных чисел при последовательных итерациях логистического уравнения для значения управляющего параметра  $a > a_\infty$ .

$n$	$x_n$	$n$	$x_n$
0	0,3000	0	0,3100
1	0,8400	1	0,8556
2	0,5376	2	0,4942
3	0,9943	3	0,9999
4	0,0225	4	0,0005
5	0,0879	5	0,0020
6	0,3208	6	0,0086
7	0,8716	7	0,0340
8	0,4476	8	0,1318
9	0,9890	9	0,4576
10	0,0434	10	0,9928
11	0,1661	11	0,0029
12	0,5542	12	0,1109
13	0,7034	13	0,3945

параметра  $a = 4,0$ , ( $a > a_\infty$ ) и два достаточно близких начальных значения  $x_0$ , например  $x_0 = 3,000$  и  $x_0 = 3,100$ . Данные расчетов, приведенные в табл. 6.3, показывают, что только результаты первых итераций  $x_n$  близки друг к другу, но очень скоро всякая связь между ними исчезает. Чем ближе друг к другу начальные значения, тем позже теряется корреляция между последовательными итерациями.

## 7. ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПОСТОЯННЫЕ ХАОСА

Анализ результатов предыдущего раздела показывает, что логистическое уравнение демонстрирует три характерные особенности хаотических систем, упоминавшихся выше:

1. Происходит перемешивание, поскольку если выделить достаточно малый интервал (например, от  $x = 0,366$  до  $x = 0,367$ ) и начать процесс при управляющем параметре  $a > a_\infty$  с любого значения  $x_0$ , то последовательность итераций  $x_2, x_3, x_4, \dots$  окажется достаточно случайной, так что рано или поздно мы получим значение  $x_n$  внутри выделенного интервала, т. е.  $0,366 \leq x_n \leq 0,367$ .
2. Система обладает плотными периодическими орбитами, что означает очень плотное расположение точек, соответствующих последовательным итерациям  $x_n$  при стремлении к аттрактору.
3. Чувствительность к выбору начальных условий демонстрируется поведением итераций при выборе различных начальных значений  $x_0$ .

Диаграммы Фейгенбаума, представленные на рис. 6.3, характеризуют последовательность бифуркаций, при каждой из которых число аттракторов  $a$  удваивается ( $1, 2, 4, 8, \dots$ ), пока управляющий параметр  $a$  не достигает значения

$$a_\infty = 3,5699456 \dots, \quad (21)$$

после чего величины  $x_n$  в последовательных итерациях становятся случайными и мы можем говорить о хаотическом поведении системы. При увеличении масштаба в области, прилегающей к каждой бифуркации, видно, что бифуркации выглядят подобными друг другу при условии последовательного увеличения масштаба. Отношение интервалов между последовательными бифуркациями по

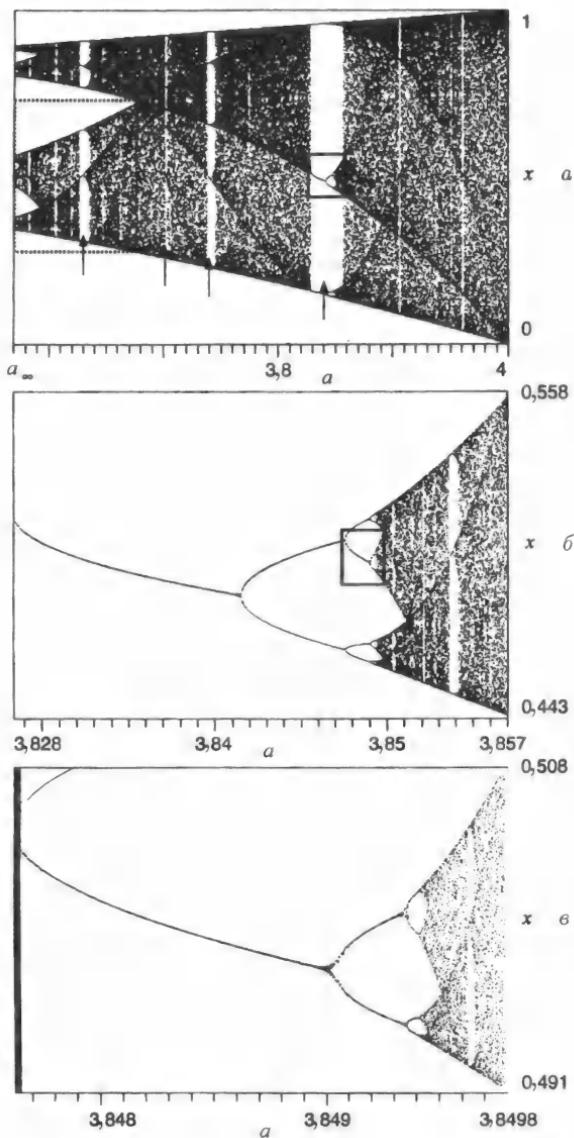


Рис. 6.4. Увеличенные изображения участков диаграммы Фейгенбаума (зависимость  $x$  от  $a$ ), соответствующих области перехода к хаосу  $a_\infty \leq a \leq 4$  (а), первой бифуркации (б) и второй бифуркации (в), вкрапленных в зону хаоса вблизи значения управляющего параметра  $a = 3,84$ . (Из книги: Peitgen O. et al., Chaos and Fractals, Springer-Verlag, Berlin, 1992, p. 637.)

горизонтали при  $n \rightarrow \infty$  сходится к пределу, называемому числом Фейгенбаума  $\delta$ , которое вычислено с высокой точностью

$$\delta = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n - a_{n-1}}{a_{n+1} - a_n} = 4,6692016\dots \quad (22)$$

Расстояние между последовательными бифуркациями по вертикали (его обычно обозначают  $\Delta_n$ ) с ростом  $n$  также уменьшается, и при  $n \rightarrow \infty$  последовательность отношений  $\Delta_n/\Delta_{n-1}$  вертикальных отрезков сходится к пределу  $\alpha$ , равному

$$\alpha = \lim \frac{\Delta_n}{\Delta_{n+1}} = 2,50290787\dots \quad (23)$$

Число Фейгенбаума  $\delta$  является универсальной постоянной и проявляется во многих хаотических системах, однако значения точки Фейгенбаума  $a_\infty$  и числа  $\alpha$  характерны для логистического уравнения.

Удивительно, что за пределом Фейгенбаума  $a_\infty$  имеются интервалы значений управляющего параметра (эти интервалы выделены на рис. 6.3 и 6.4 белым цветом), которым внутри зоны хаотического поведения системы соответствуют вкрапленные в них области упорядоченности с удвоением аттракторов и периода. На рис. 6.4 показана такая область упорядоченности вблизи  $a = 3,84$  и приведено увеличенное изображение расположенных там двух бифуркаций.

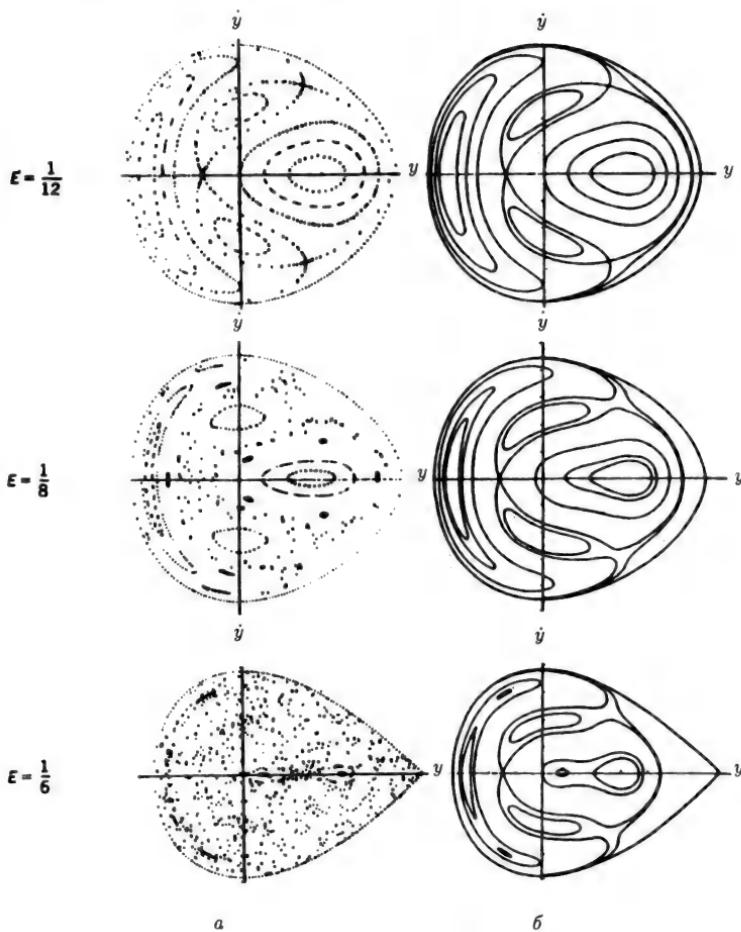
Удвоение периода столь же типично для многих хаотических систем, как и универсальная постоянная Фейгенбаума. Это число измерялось экспериментально на ряде физических систем, демонстрирующих удвоение периода и возникновение хаоса. Такие системы известны в гидродинамике ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{He}$ ,  $\text{Hg}$ ), электронике (диоды, транзисторы), лазерной технике, физике твердого тела (джозефсоновские переходы) и акустике ( $\text{He}$ ).

## 8. ХАОС В РАЗЛИЧНЫХ СИСТЕМАХ

До сих пор мы говорили о хаосе применительно к одномерному логистическому уравнению. Однако существует множество других систем с хаотическим поведением, и мы кратко рассмотрим некоторые из них.

В качестве первого примера рассмотрим систему связанных гармонических осцилляторов Хеннона—Хейла, безразмерный гамильтониан которой имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2) + \left(x^2 - \frac{y^2}{3}\right)y, \quad (24)$$



**Рис. 6.5.** Отображения Пуанкаре, получаемые сечением энергетической поверхности Хеннона—Хейла плоскостью  $y, p_y$  для трех значений энергии:  $E = 1/12$  (область нормального поведения системы),  $E = 1/8$  (вблизи перехода к хаосу) и  $E = 1/6$  (область хаотического поведения). Каждая точка на рисунках слева соответствует траектории, пересекающей плоскость  $y, p_y$ . На рисунках справа представлены траектории, вычисленные по теории возмущений. В области нормального поведения системы точки ложатся на регулярные траектории, вычисленные по теории возмущений, а в области хаотического поведения наблюдается значительная неупорядоченность системы. (Gustavson F., Astron. J., **71**, 1996, 670; Moser J., Amer. Math. Soc. **81**, 1968; Creswick R. J., Farach H. A., Poole C. P., Introduction to Renormalization Group Methods in Physics, Wiley, New York, 1992, p. 36.)

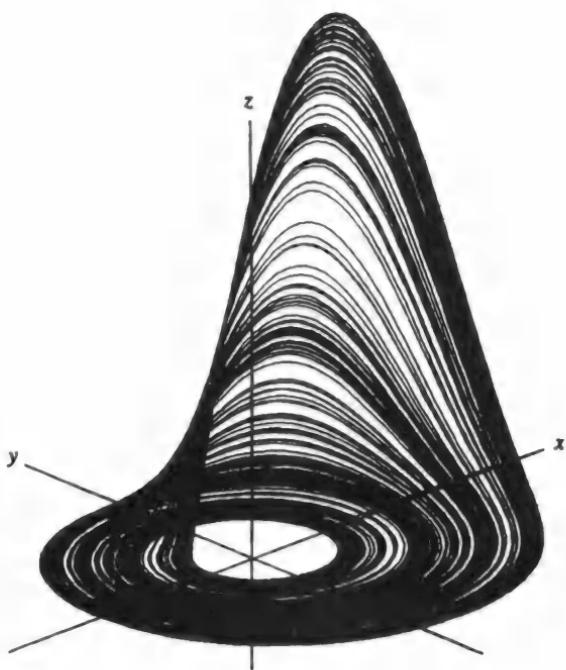


Рис. 6.6. Аттрактор Рёссlerа. Траектория системы сначала соответствует плотно прилегающим спиральным орбитам в плоскости  $x, y$ , а затем — значительно более разреженным орбитам вдоль оси  $z$ , образующим «выбросы» с последующим возвращением в исходную плоскость. (Из книги: Peitgen O. et al., Chaos and Fractals, Springer-Verlag, Berlin, 1992, р. 688.)

где первый член соответствует обычному двумерному гармоническому осциллятору, а второй  $\mathcal{H}_{\text{связ}} = x^2 - y^2/3$  может рассматриваться в качестве возмущения, величину которого следует вычислить. Интерес к гамильтониану такого типа обусловлен тем, что астрономы используют его при моделировании движения звезды в цилиндрически симметричном потенциале галактического диска.

Энергия является интегралом движения, вследствие чего орбиты лежат на трехмерной гиперповерхности постоянной энергии в четырехмерном фазовом пространстве  $p_x, p_y, x, y$ . На рис. 6.5 представлены разрезы такой энергетической поверхности плоскостью  $p_y, y$  (так называемые отображения Пуанкаре) при трех значениях безразмерной энергии  $E = 1/12, 1/8$  и  $1/6$ . Отображения Пуанка-

ре (б) в правой части рисунка, рассчитанные по обычной теории возмущений, показывают, каким образом поверхность постоянной энергии пересекается плоскостью  $p_y, y$ . Такие расчеты по теории возмущений вообще не учитывают возможность хаотического поведения системы. Более реалистическое численное моделирование на ЭВМ (левая часть рис. 6.5, а) воспроизводит нормальное поведение системы при низшей энергии  $E = 1/12$  и всеобщий хаос при высшей энергии  $E = 1/6$ . Промежуточной энергии  $E = 1/8$  соответствует область, соседствующая с хаосом. Аналогичные отображения Пуанкаре для плоскости  $p_x, x$  (не приведенные на рисунке) соответствуют орбитам, отличающимся от орбит в плоскости  $p_y, y$ , из-за отсутствия симметрии у члена  $\mathcal{H}_{\text{связ}}$ , однако зависимость степени хаоса от энергии сохраняется.

Некоторые системы связанных уравнений тоже описывают переход к хаосу. Рёсслер предложил следующую систему уравнений, которые мы для удобства представляем в виде функций времени:

$$\begin{aligned} x'(t) &= -[y(t) + z(t)], \\ y'(t) &= x(t) + ay(t), \\ z'(t) &= b + z(t)[x(t) - c]. \end{aligned} \quad (25)$$

Типичные трехмерные траектории, отвечающие этой системе, показаны на рис. 6.6. Большую часть времени система движется вблизи своего аттрактора в плоскости  $x, y$ , где она удаляется от аттрактора по спирали, пока не достигает порогового значения, после которого траектория «взмывает» вверх вдоль оси  $z$  к максимальному значению. Затем траектория снижается и вновь попадает в область плотных орбит вблизи плоскости  $x, y$ , чтобы вновь начать движение по спирали от аттрактора. Последовательность таких подъемов по спирали и спусков в область плотных орбит, непрерывно повторяясь, создает изображенную на рисунке картину.

На рис. 6.7 диаграмма Фейгенбаума для системы Рёсслера представлена в виде зависимости минимальных значений  $|x|$  от параметра  $c$  в диапазоне  $2,5 < c < 10$  при фиксированных значениях двух других параметров  $a = b = 0,2$ . Минимальному значению  $c$  отвечает единственное значение  $|x|$ , отчего движение системы представляется собой виток спирали в плоскости  $x, y$  с последующим подъемом вдоль оси  $z$ , затем еще один виток спирали и т.д. После одной бифуркации на диаграмме Фейгенбаума (для примера при  $c = 3,5$ ) система совершает два витка спирали в плоскости  $x, y$  перед подъемом вдоль оси  $z$  и т.д. На рис. 6.8 показана траектория системы

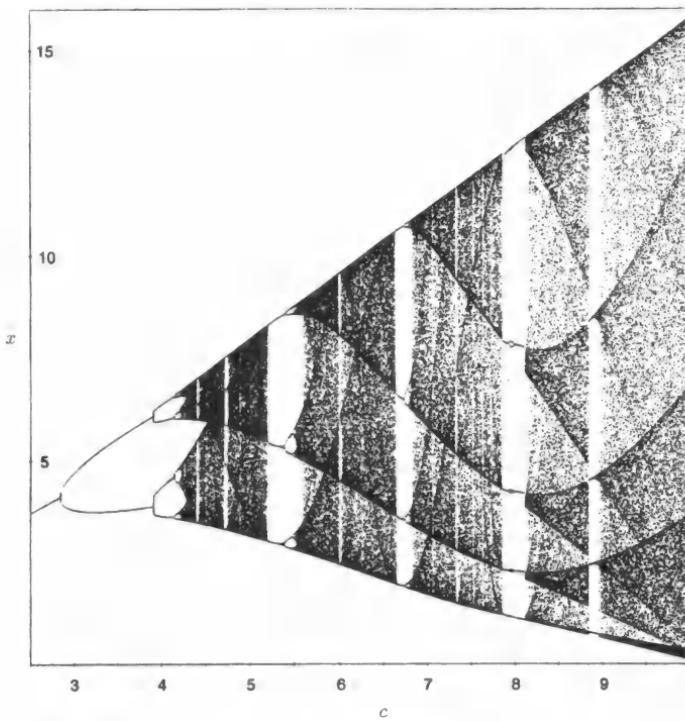


Рис. 6.7. Диаграмма Фейгенбаума (зависимость  $x$  от  $c$ ) для модели Рёссlera с параметрами  $a = b = 0,2$  в уравнении (25) при значениях  $2,5 < c < 10$ . При  $c = 8$  видно пять значений  $|x|$ , соответствующих пяти спиралям на рис. 6.8. (Из книги: Peitgen O. et al., Chaos and Fractals, Springer-Verlag, Berlin, 1992, p. 692.)

с пятью витками спирали в плоскости  $x, y$  и последующим подъемом вдоль оси  $z$ , возникающая при  $c = 8$ , что соответствует пяти значениям  $|x|$ , как видно из рис. 6.7.

Аналогичную систему уравнений предложил Э. Лоренц. Без учета зависимости от времени эта система имеет вид

$$\begin{aligned} x' &= \sigma(x + y), \\ y' &= Rx - y - xz, \\ z' &= -Bz + xy. \end{aligned} \tag{26}$$

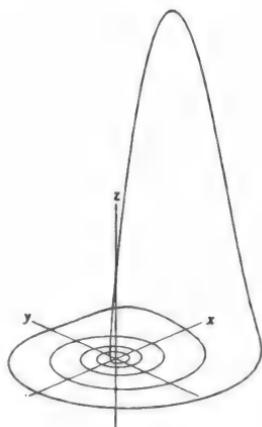


Рис. 6.8. Периодическая орбита, связанная с аттрактором Рёсслера для значений  $a = b = 0,2$  и  $c = 8$ . Каждому выбросу вдоль оси  $z$  соответствует пять витков спирали в плоскости  $x, y$ , что связано с пятью значениями  $|x|$  при  $c = 8$  на диаграмме Фейгенбаума, рис. 6.7. (Из книги: Peitgen O. et al., *Chaos and Fractals*, Springer-Verlag, Berlin, 1992, р. 693.)

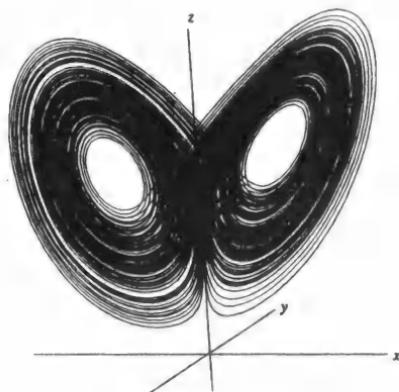


Рис. 6.9. Два листа спиральных траекторий для аттрактора Лоренца. Траектория точки, изображающей систему, представляет собой разворачивающуюся спираль на одном листе, которая затем «перескакивает» во внутреннюю область второго листа, после чего развертывание спирали с последующим перескоком повторяется и т. д. (Из книги: Peitgen O. et al., *Chaos and Fractals*, Springer-Verlag, Berlin, 1992, р. 698.)

Для трех безразмерных параметров в этих уравнениях Лоренц зафиксировал следующие значения:

$$\sigma = 10, \quad B = 8/3, \quad R = 28. \quad (27)$$

Траектории такой системы, показанные на рис. 6.9, представляют собой спирали, располагающиеся на двух листах, в каждом из которых спираль раскручивается до тех пор, пока не достигнет порога. Затем происходит перескок траектории во внутреннюю часть второго листа, после чего спираль вновь раскручивается. Такое спиральное движение наружу с перескоком во внутреннюю часть другого листа повторяется непрерывно.

# ГЛАВА 7

---

## ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе обсуждаются основные представления специальной теории относительности и их применение к четырехмерным векторным величинам (4-векторам) в механике и электродинамике. Рассмотрены свойства 4-векторов, законы их преобразования и соответствующие инварианты. В конце главы кратко обсуждаются преобразования переноса в пространстве и времени, а также вопросы, связанные с четностью и обращением времени.

### 2. НЬЮТОНОВСКАЯ МЕХАНИКА

В первоначальной формулировке механики Ньютона неявно предполагалось, что законы физики в системах координат  $(x', y', z')$  и  $(x, y, z)$ , движущихся относительно друг друга с постоянной скоростью  $v$ , связаны преобразованием Галилея. Это означает, что каждый вектор  $\mathbf{r}$  в лабораторной (стационарной) системе координат связан с соответствующим вектором  $\mathbf{r}'$  в движущейся системе уравнением

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t. \quad (1)$$

Последовательно дифференцируя это выражение дважды по времени, мы получим соответственно скорости и ускорения

$$\dot{\mathbf{r}}' = \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{v}, \quad (2)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}' = \ddot{\mathbf{r}}. \quad (3)$$

Равенство

$$\mathbf{a}' = \mathbf{a} \quad (4)$$

показывает, что в ньютоновской механике величина ускорения одинакова в обеих (движущейся и стационарной) системах координат.

### 3. ПОСТОЯНСТВО СКОРОСТИ СВЕТА

Сто лет назад Майкельсон и Морли установили, что измеренная экспериментально скорость света одинакова во всех равномерно движущихся системах координат независимо от направления его распространения. Ранее ожидалось, что результаты измерений, проведенных в выделенной системе координат, не должны отличать эту систему от любой другой системы, движущейся равномерно относительно первой. В более общем виде постулат эквивалентности означает требование, согласно которому законы физики должны иметь один и тот же вид во всех равномерно движущихся системах координат. Из этого следует, что переход из одной такой системы в другую должен сохранять неизменным вид этих законов.

Поскольку в эксперименте было доказано, что скорость света постоянна, то преобразования Галилея, согласно которым скорость должна была изменяться, оказались несостоятельны. Проблему удалось решить, введя время в качестве дополнительной координаты и используя для перехода между двумя системами координат, движущимися равномерно относительно друг друга, «вращение» в этом пространстве-времени, названное преобразованием Лоренца.

### 4. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛОРЕНЦА

Рассмотрим две системы координат  $x, y, z, ct$  и  $x', y', z', ct'$ , описывающие четырехмерное пространство-время в так называемом пространстве Минковского, где время соответствует четвертой координате  $x_4 = ct$ . Пусть «штрихованная» координатная система движется вдоль оси  $z$  со скоростью  $v$  относительно «нештрихованной» системы, как показано на рис. 7.1. Преобразование Лоренца, связывающее эти две системы, имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & -\beta\gamma \\ 0 & 0 & -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ ct' \end{pmatrix}, \quad (5)$$

что дает

$$\begin{aligned} x' &= x, \\ y' &= y, \\ z' &= \gamma(z - \beta ct), \\ ct' &= \gamma(ct - \beta z), \end{aligned} \quad (6)$$

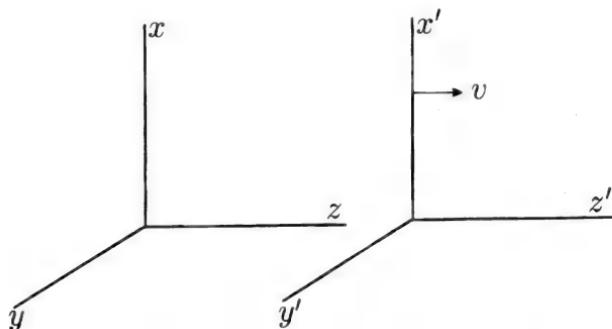


Рис. 7.1. Штрихованная система координат  $x', y', z'$ , движущаяся вправо со скоростью  $v$  относительно нештрихованной системы  $x, y, z$ .

где

$$\beta = v/c, \quad (7)$$

$$\gamma = \frac{1}{(1 - \beta^2)^{1/2}}. \quad (8)$$

Так выглядит преобразование Лоренца вдоль оси  $z$ . В терминах пространства-времени это преобразование соответствует «вращению» в плоскости  $z, ct$ .

Преобразование Лоренца сохраняет квадрат 4-вектора в пространстве-времени (или величину четырехмерного интервала)

$$(x, y, z, -ct) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix} = (x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2), \quad (9)$$

где у контравариантного вектора (столбца) временная компонента положительна, а у ковариантного вектора (строки) — отрицательна. В более общем случае преобразование Лоренца оставляет неизменной величину квадрата четырехмерного вектора (с компонентами  $V_x, V_y, V_z, V_t$ ), которая равна

$$V_x^2 + V_y^2 + V_z^2 - V_t^2. \quad (10)$$

При одном и том же преобразовании Лоренца скалярное произведение двух 4-векторов также остается неизменным

$$V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z - V_t W_t = V'_x W'_x + V'_y W'_y + V'_z W'_z - V'_t W'_t, \quad (11)$$

что можно записать и в более компактной форме:

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{W} - V_t W_t = \mathbf{V}' \cdot \mathbf{W}' - V'_t W'_t. \quad (12)$$

Чтобы пролить свет на сущность преобразования Лоренца как операции вращения в пространстве-времени, можно выразить это преобразование как сдвиг по быстроте  $\zeta$ , которая определяется как

$$\operatorname{th}\zeta = \beta, \quad (13a)$$

$$\operatorname{sh}\zeta = \beta\gamma, \quad (13b)$$

$$\operatorname{ch}\zeta = \gamma, \quad (13c)$$

после чего уравнения (6) переходят в

$$\begin{aligned} V'_x &= V_x, \\ V'_y &= V_y, \\ V'_z &= V_z \operatorname{ch}\zeta - V_t \operatorname{sh}\zeta, \\ V'_t &= -V_z x \operatorname{sh}\zeta + V_t \operatorname{ch}\zeta. \end{aligned} \quad (14)$$

Рассмотрим два последовательных вращения в пространстве-времени на углы  $\zeta$  и  $\zeta'$

$$\zeta'' = \zeta + \zeta' \quad (15)$$

в одной и той же плоскости пространства-времени (т. е. для одного направления скорости). Тригонометрическое тождество

$$\operatorname{th}\zeta'' = \operatorname{th}(\zeta + \zeta') \quad (16)$$

или

$$\operatorname{th}\zeta'' = \frac{\operatorname{th}\zeta + \operatorname{th}\zeta'}{1 - \operatorname{th}\zeta \operatorname{th}\zeta'} \quad (17)$$

приводит к выражению

$$\beta'' = \frac{\beta + \beta'}{1 + \beta\beta'}, \quad (18)$$

которое называют законом Эйнштейна сложения параллельных скоростей. Легко заметить, что если одна из скоростей равна  $c$  (т. е. либо  $\beta = 1$ , либо  $\beta' = 1$ ), то также  $\beta'' = 1$ . Таким образом, значение  $\beta''$  не может превышать единицу и скорость света  $c$  является предельно достижимой скоростью. При низких скоростях ( $\beta, \beta' \ll 1$ ) членом  $\beta\beta'$  можно пренебречь, и тогда формула (18) сводится к обычному преобразованию Галилея. т. е.  $v'' = v + v'$ .

## 5. ПРОШЕДШЕЕ И БУДУЩЕЕ

Можно сказать, что 4-вектор  $(\mathbf{r}, ct)$  представляет некое «событие» в четырехмерной системе координат с началом в точке  $x = y =$



Рис. 7.2. Пространственно-временная диаграмма в координатах  $ct$  и  $x$ , показывающая области событий в прошедшем, будущем и других точках пространства. Эти области разделены пунктирными «световыми линиями», соответствующими движению со скоростью света.

$z = t = 0$  подобно тому, как пространственный вектор  $\mathbf{r}$  в обычном координатном пространстве обозначает положение некой точки относительно начала координат  $x = y = z = 0$ .

В зависимости от знака величины квадрата длины вектора (которая в нашем случае равна  $r^2 - c^2 t^2$ ) существуют следующие типы 4-векторов:

$$\begin{aligned} r^2 - c^2 t^2 &< 0 && \text{времениподобный,} \\ r^2 - c^2 t^2 &= 0 && \text{светоподобный (или изотропный),} \\ r^2 - c^2 t^2 &> 0 && \text{пространственноподобный.} \end{aligned} \quad (19)$$

Времениподобный 4-вектор сопоставляет некоторое событие в прошедшем при  $t < 0$  некоторому событию в будущем при  $t > 0$ , как показано на рис. 7.2. Равный нулю интервал соответствует движению со скоростью света,  $x = ct$ . Пространственноподобный случай отвечает событию, которое ни в прошедшем, ни будущем не происходит в начале координат, а осуществляется в какой-то другой точке пространства. Точки на вертикальной (временной) оси соответствуют событиям в прошедшем ( $t < 0$ ) или будущем ( $t > 0$ ), которые происходят в той же точке пространства, где располагается начало системы координат, а точки вдоль оси  $x$  соответствуют событиям, происходящим где-то в пространстве одновременно с событием в начале системы координат.

Таким образом, всегда можно найти такое преобразование Лоренца, которое позволит «перевести» будущее событие из некой точки пространства также в будущее событие в точке  $x = 0$ , соответствующей началу пространственной системы координат. Аналогично событие в удаленной точке пространства можно преобразовать в событие, происходящее одновременно с событием в начале координат. Именно этим обусловлен выбор названий для 4-векторов (времениподобный и пространственноподобный) соответственно в случаях  $r^2 < c^2 t^2$  и  $r^2 > c^2 t^2$ .

Пусть, например, в некоторой точке на поверхности Земли происходит вспышка света, а через  $\tau$  секунд — другая вспышка в точке, удаленной от первой на 1200 км. Будут ли эти события времениподобными или пространственноподобными по отношению друг к другу? Поскольку свет распространяется со скоростью 300 000 км/с (или 300 км/мс), он преодолевает расстояние между этими точками за 4 мс. Если второе событие происходит на 8 минут позднее первого, то теоретически можно представить себе движущийся со скоростью 150 км/мс космический корабль или спутник, пролетающий над местом первой вспышки одновременно с ней и проходящий над второй точкой как раз в момент второй вспышки. При этом обе вспышки будут зарегистрированы непосредственно под космическим кораблем, т. е. в одной и той же точке в системе координат, связанной с кораблем. Следовательно, эти события будут пространственноподобными.

Предположим теперь, что вторая вспышка происходит лишь через 2 мс после первой. Скорости космического корабля в этом случае уже не достаточно, чтобы оба события произошли в одной и той же точке его собственной системы координат. Оба события будут одновременны, если корабль в момент регистрации обеих вспышек находится точно на полпути между источниками света. Для определения скорости, с которой корабль должен двигаться, чтобы это произошло, запишем преобразование Лоренца для указанных событий:

$$0 = \gamma(c\Delta t - \beta\Delta x), \quad (20)$$

где  $\Delta x = 1200$  км и  $\Delta t = 2$  мс, что дает  $\beta = 0,5$ . При меньшей скорости сигнал от первого события поступит раньше, а при большей — позднее, чем сигнал от второго события.

В табл. 7.1 приведены пространственные и временные составляющие некоторых 4-векторов. В зависимости от конкретной величины составляющих большинство этих 4-векторов могут быть

Таблица 7.1. Пространственные и временные составляющие некоторых встречающихся в физике 4-векторов.

Название 4-вектора	Пространственная часть	Временная часть	Тип 4-вектора	Значение в покоящейся системе
Координата, время	$\mathbf{r}$	$ct$	—	—
Импульс, энергия	$\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$	$E/c = \gamma m c$	времениподобный	$mc$
Сила	$\gamma \mathbf{F}$	$\gamma \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\beta}$	пространственноподобный	$\mathbf{F}$
Потенциал электромагнитного поля	$\mathbf{A}$	$\phi/c$	—	—
Градиент	$\nabla$	$-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$	—	—
Волновой вектор	$\mathbf{k}$	$\omega/c$	светоподобный	0
Заряд, ток	$\mathbf{J}$	$c\rho$	—	—

либо времениподобными, либо пространственноподобными. Например, четырехмерный вектор-потенциал электромагнитного поля пространственноподобен, если  $A > \phi/c$ , и времениподобен, если  $A < \phi/c$ . Однако другие 4-векторы в силу своей природы принадлежат только к определенному типу. Очевидно, что 4-вектор, описывающий распространение электромагнитной волны в свободном пространстве (его называют волновым вектором), всегда является светоподобным (поскольку для него постоянно выполняется условие  $k = \omega/c$ ). С другой стороны, 4-вектор энергии-импульса всегда времениподобен, так как надлежащим преобразованием системы координат можно перейти в систему, где частица покоятся, т. е.  $p = 0$  и  $E = mc^2$ . Приравняв  $(p^2 - E^2/c^2)$  к величине  $-m^2c^2$ , соответствующей системе покоя, мы получим хорошо известное выражение для энергии релятивистской частицы

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (21)$$

При этом вектор четырехмерной скорости  $U$  имеет как пространственную  $\gamma \mathbf{v}$ , так и временную  $\gamma c$  составляющие.

## 6. ЛОРЕНЦЕВО СОКРАЩЕНИЕ ДЛИНЫ И ЗАМЕДЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ

Представим себе наблюдателя, следящего за космическим кораблем, который движется со скоростью  $v$  относительно связанной с Землей лабораторной системы координат. Длина космического корабля в собственной системе координат, где он покоятся, в направлении движения составляет  $\ell_0$ , а часы на руке космонавта показывают, что каждый оборот вокруг Земли совершается за  $\Delta t_0$  с. Нас интересует, какие результаты получит наблюдатель на Земле, измеряя длину космического корабля  $\ell$  и время  $\Delta t$  по наручным часам космонавта.

Преобразования Лоренца позволяют перейти от двух событий  $x_1, t_1$  и  $x_2, t_2$  в нештрихованной системе координат (корабль) к событиям в штрихованной системе (лаборатория):

$$\begin{aligned} x'_2 - x'_1 &= \gamma[(x_2 - x_1) - \beta c(t_2 - t_1)], \\ t'_2 - t'_1 &= \gamma[(t_2 - t_1) - (\beta/c)(x_2 - x_1)]. \end{aligned} \quad (22)$$

Время измеряется при условии  $x_1 = x_2$ , поскольку часы неподвижны относительно корабля, так что

$$t'_2 - t'_1 = \gamma(t_2 - t_1) \quad (23)$$

или

$$\Delta t' = \gamma \Delta t_0, \quad (24)$$

т. е. время на космическом корабле замедляется. Рассмотрим, например, пи-мезон (пион), время жизни которого в покое составляет 0,026 мкс. Если пион движется со скоростью  $\beta = 0,9999$ , то  $\gamma = 70,7$ , и время жизни в лабораторной системе возрастает до 1,84 мкс. При такой скорости насекомые, в нормальных условиях живущие обычно не дольше недели, вполне могли бы жить годами!

Рассмотрим теперь длину космического корабля  $\ell_0 = x_2 - x_1$ . Поскольку положение концов корабля измеряется с Земли одновременно, то  $t'_2 = t'_1$ , и уравнения (22) превращаются в

$$\begin{aligned} \ell' &= \gamma[\ell_0 - \beta c(t_2 - t_1)], \\ 0 &= \gamma[(t_2 - t_1) - (\beta \ell_0/c)]. \end{aligned} \quad (25)$$

Исключая  $t_2 - t_1$ , мы получим окончательно выражение

$$\ell' = \ell_0/\gamma, \quad (26)$$

которое показывает, что при наблюдении с Земли космический корабль кажется укороченным. Это явление называют лоренцевым сокращением.

## 7. ЭФФЕКТ ДОПЛЕРА

Формулы для релятивистского эффекта Доплера в случае световой волны можно вывести, используя преобразование четырехмерного волнового вектора  $\mathbf{k}, \omega/c$  в штрихованную систему координат, которая движется со скоростью  $v$ . Эти преобразования имеют вид

$$\begin{aligned} k'_\parallel &= \gamma(k_\parallel - \beta\omega/c), \\ k'_\perp &= k_\perp, \\ \omega' &= \gamma(\omega - \beta ck_\parallel), \end{aligned} \quad (27)$$

причем в случае световой волны

$$k^2 - \omega^2/c^2 = (k')^2 - (\omega')^2/c^2 = 0. \quad (28)$$

Полагая  $k_\parallel = k \cos \theta$ , получим

$$\omega' = \omega\gamma(1 - \beta \cos \theta). \quad (29)$$

Для специальных случаев продольного ( $\theta = 0$ ) и поперечного ( $\theta = \pi/2$ ) эффекта Доплера (эти случаи соответствуют ситуациям, когда вектор  $\beta$  параллелен и перпендикулярен вектору  $\mathbf{k}$ , соответственно) имеем

$$\omega' = \omega \left( \frac{1 - \beta}{1 + \beta} \right)^{1/2} \quad \begin{array}{l} \text{продольный эффект} \\ \theta = 0 \\ \beta \parallel \mathbf{k} \end{array} \quad (30)$$

$$\omega' = \gamma\omega \quad \begin{array}{l} \text{поперечный эффект} \\ \theta = \pi/2 \\ \beta \parallel \mathbf{k} \end{array} \quad (31)$$

Можно также показать, что

$$\operatorname{tg} \theta' = \frac{k'_\perp}{k'_\parallel} = \frac{\sin \theta}{\gamma(\cos \theta - \beta)}. \quad (32)$$

## 8. ВТОРОЙ ЗАКОН НЬЮТОНА

Второй закон Ньютона может быть записан в ковариантном виде

$$K_\mu = \frac{d}{d\tau} p_\mu \quad (33)$$

через 4-силу  $K_\mu$  и 4-импульс  $p_\mu = mu_\mu$ , где  $u_\mu = (\gamma\mathbf{v}, \gamma c)$  — 4-скорость, а собственное время  $\tau$  связано с обычным временем  $t$  формулой

$$dt = \gamma d\tau; \quad (34)$$

4-сила имеет пространственную и временную составляющие

$$K_\mu = (\gamma \mathbf{F}, \gamma \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\beta}), \quad (35)$$

вследствие чего закон Ньютона можно записать раздельно для каждой из составляющих:

$$\mathbf{F} = \frac{d}{dt} m \gamma \mathbf{v}, \quad (36)$$

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = c^2 \frac{d}{dt} m \gamma. \quad (37)$$

Легко показать, что скалярное произведение 4-векторов силы и скорости равно нулю.

## 9. СКАЛЯРНЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ И ИНВАРИАНТЫ

Мы уже упоминали, что скалярные произведения 4-векторов представляют собой инварианты. Рассмотрим, например, скалярное произведение четырехмерного радиуса-вектора (координаты времени) и четырехмерного волнового вектора

$$(\mathbf{k}, \omega/c) \cdot (\mathbf{r}, ct) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t. \quad (38)$$

Это скалярное произведение присутствует в хорошо известном выражении  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}$ , описывающем распространение плоской волны.

Ряд важных инвариантных соотношений можно получить в виде скалярных произведений с участием 4-вектора градиента  $\nabla, -(1/c)\partial/\partial t$ . При этом следует отметить, что временная составляющая этого 4-вектора в отличие от других 4-векторов имеет знак минус. В качестве примеров таких лоренц-инвариантных скалярных произведений можно привести уравнение для 4-вектора потенциала электромагнитного поля.

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (39)$$

и уравнение непрерывности 4-вектора тока

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (40)$$

которые инвариантны относительно преобразований Лоренца.

Скалярное произведение 4-градиента на самого себя, называемое даламберианом, или оператором Даламбера

$$\square^2 = \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \quad (41)$$

представляет собой скалярный оператор. При действии на скалярную функцию мы получаем волновое уравнение

$$\square^2 \Psi = 0. \quad (42)$$

Используя выражение для скорости распространения электромагнитной волны в свободном пространстве  $c^2 = 1/\mu_0 \epsilon_0$  и оператор Даламбера, можно получить следующие уравнения, связывающие пространственные и временные компоненты 4-векторов потенциала электромагнитного поля и тока:

$$\square^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J}, \quad (43)$$

$$\square^2 \phi = -\rho/\epsilon_0. \quad (44)$$

## 10. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ БОЛЕЕ ОБЩЕГО ВИДА

До сих пор мы рассматривали вращения в пространстве и пространстве-времени, не учитывая преобразований переноса. В пространстве Минковского существует преобразование более общего вида, сохраняющее постоянство скорости света. Его называют преобразованием Пуанкаре или неоднородным преобразованием Лоренца. Это преобразование переводит 4-вектор  $V$  в  $V'$

$$V' = L_G V + b, \quad (45)$$

где  $L_G$  — обобщенное преобразование Лоренца (его иногда называют однородным преобразованием Лоренца), а  $b$  учитывает перенос начала координат в пространстве-времени. Преобразование Пуанкаре содержит десять независимых параметров, четыре из которых определяют перенос вдоль осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и  $ct$ , три — скорости сдвига, или буста,  $v_x$ ,  $v_y$  и  $v_z$ , и три — эйлеровы углы при вращении в пространстве.

Обобщенное преобразование Лоренца  $L_G$  включает переход от ненешихованной системы  $x, y, z, ct$  к штрихованной  $x', y', z', ct'$ , в которой начало новой системы координат движется со скоростью  $v$ , а новые оси координат повернуты относительно старых. Преобразование  $L_G$  может быть разложено на произведение пространственного вращения  $R$  и преобразования Лоренца, не связанного с поворотом системы координат, или буст  $L$ , т. е.

$$L_G = RL = L'R', \quad (46)$$

причем в общем случае  $R \neq R'$  и  $L \neq L'$ . Пространственные вращения не коммутируют с преобразованиями Лоренца, за исключением

случая, когда направление сдвига скорости совпадает с осью вращения. В гл. 3 мы уже отмечали, что  $R$  и  $R'$  в общем случае имеют вид

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta_{xx} & \cos \theta_{xy} & \cos \theta_{xz} \\ \cos \theta_{yx} & \cos \theta_{yy} & \cos \theta_{yz} \\ \cos \theta_{zx} & \cos \theta_{zy} & \cos \theta_{zz} \end{pmatrix}, \quad (47)$$

а буст  $L$  в самом общем случае может быть записан в виде действительной и симметричной матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{(\gamma - 1)\beta_x^2}{\beta^2} & \frac{(\gamma - 1)\beta_x\beta_y}{\beta^2} & \frac{(\gamma - 1)\beta_x\beta_z}{\beta^2} & -\beta_x\gamma \\ \frac{(\gamma - 1)\beta_y\beta_x}{\beta^2} & 1 + \frac{(\gamma - 1)\beta_y^2}{\beta^2} & \frac{(\gamma - 1)\beta_y\beta_z}{\beta^2} & -\beta_y\gamma \\ \frac{(\gamma - 1)\beta_z\beta_x}{\beta^2} & \frac{(\gamma - 1)\beta_z\beta_y}{\beta^2} & 1 + \frac{(\gamma - 1)\beta_z^2}{\beta^2} & -\beta_z\gamma \\ -\beta_x\gamma & -\beta_y\gamma & -\beta_z\gamma & \gamma \end{pmatrix}, \quad (48)$$

определитель которой равен  $+1$ . При обсуждении пространственных вращений в гл. 3 мы уже отмечали, что их можно разделить на собственные, детерминант которых  $|R| = +1$ , и несобственные, с  $|R| = -1$ . Собственные и несобственные вращения образуют непересекающиеся множества в том смысле, что все собственные вращения, например, могут быть преобразованы друг в друга последовательностью бесконечно малых собственных вращений. Аналогичное справедливо для несобственных вращений, однако не существует последовательности инфинитезимальных матриц, которая переведила бы собственные вращения в несобственные, или наоборот. Подобное преобразование требует операции инверсии, вследствие чего собственные и несобственные вращения никогда не переходят друг в друга. Другими словами, векторы нашего реального мира и их зеркальные отражения нельзя преобразовать друг в друга никакими пространственными вращениями.

Говоря о пространственно-временном многообразии мира Минковского, следует отметить, что имеется четыре набора непересекающихся преобразований и четыре набора 4-векторов. Общее преобразование Лоренца (48) является собственным в том смысле, что оно не включает в себя инверсию. В пространстве Минковского возможны следующие операции: пространственная инверсия, связанная с входящей в уравнение (46) матрицей  $R$ ; инверсия времени, связанная с бустом  $L$  в том же уравнении и, наконец, пространственно-временная инверсия, в которой участвуют обе

матрицы,  $R$  и  $L$ . Ниже приводятся матрицы, производящие эти три типа инверсий.

$$\begin{pmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & +1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{инверсия} \\ \text{пространства} \\ (\text{изменение} \\ \text{четности } P) \end{array} \begin{array}{ll} x \rightarrow -x & |R| = -1 \\ y \rightarrow -y & \\ z \rightarrow -z & |L| = +1 \\ t \rightarrow t & \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} +1 & & & \\ & +1 & & \\ & & +1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{инверсия} \\ \text{времени} \\ (\text{обращение} \\ \text{времени } T) \end{array} \begin{array}{ll} x \rightarrow x & |R| = +1 \\ y \rightarrow y & \\ z \rightarrow z & |L| = -1 \\ t \rightarrow -t & \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{инверсия} \\ \text{пространства-} \\ \text{времени} \\ (PT) \end{array} \begin{array}{ll} x \rightarrow -x & |R| = -1 \\ y \rightarrow -y & \\ z \rightarrow -z & |L| = -1 \\ t \rightarrow -t & \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{тождественное} \\ \text{преобразование} \end{array} \begin{array}{ll} x \rightarrow x & |R| = +1 \\ y \rightarrow y & \\ z \rightarrow z & |L| = +1 \\ t \rightarrow t & \end{array}$$

Мы знаем, что многие законы физики инвариантны относительно операций изменения четности  $P$  и обращения времени  $T$ , которые соответствуют первым двум матрицам, причем указанные операции коммутативны, т. е.  $PT = TP$ . Существует также третья операция, называемая зарядовым сопряжением, которая переводит частицы в античастицы. Соответственно существует инвариантность относительно этих трех операций, называемая СРТ-инвариантностью. Этот вопрос рассмотрен в гл. 26.

# ГЛАВА 8

---

## ТЕРМОДИНАМИКА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Термодинамика принадлежит к тем разделам физики, которые неизначительно изменились за последнее столетие. В этой главе изложены основы классической термодинамики и приведены некоторые примеры ее применения. В конце главы очень кратко затронута проблема вывода термодинамики из статистической механики. Для простоты ряд принципов иллюстрируется законами идеального газа.

Особое значение в термодинамике имеют так называемые обратимые, квазистатические процессы. Рассмотрим систему, находящуюся под воздействием внешних условий, которые удерживают эту систему в некотором начальном состоянии. Затем ограничения снимаются, и система переходит в конечное состояние. Если восстановление ограничений возвращает систему в начальное состояние, то такой переход называется обратимым. Если же при восстановлении ограничений система не возвращается в исходное состояние, то процесс необратим. Если система изменяется столь медленно, что ее состояние все время остается сколь угодно близким к равновесному, то такой процесс называется квазистатическим. В этой главе мы будем иметь дело в основном с обратимыми квазистатическими процессами.

### 2. ПОЛНЫЕ И НЕПОЛНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЫ

Некоторая особенность термодинамических задач связана с различием между величинами, которые не могут быть записаны в виде полных дифференциалов функции многих переменных (например, выражение для приращения теплоты  $dQ$ ), и величинами, представляющими собой полные дифференциалы (например, энтропия

$dS = \frac{dQ}{T}$ <sup>1</sup>). Поэтому сначала уясним некоторые математические проблемы. Рассмотрим функцию  $F(x, y)$  двух независимых переменных  $x$  и  $y$ . Приращение  $dF$  имеет вид

$$dF = F(x + dx, y + dy) - F(x, y) \quad (1)$$

и часто записывается в форме

$$dF = A(x, y)dx + B(x, y)dy; \quad (2)$$

$dF$  – будет полным дифференциалом, если

$$\left( \frac{\partial A}{\partial y} \right)_x = \left( \frac{\partial B}{\partial x} \right)_y. \quad (3)$$

Важное свойство полного дифференциала состоит в том, что величина криволинейного интеграла

$$K = \int_1^2 dF, \quad (4)$$

взятого между точками  $x_1, y_1$  и  $x_2, y_2$ , не зависит от пути перехода между этими точками в плоскости  $x, y$ . Неполный дифференциал также можно записать в виде (2), однако условие (3) для него не выполняется, вследствие чего значение интеграла  $K$  зависит от конкретного пути перехода из точки 1 в точку 2. Например, при наличии трения приращение работы  $dW$  не будет полным дифференциалом и соответствующий интеграл зависит от пути перехода.

### 3. ЗАКОНЫ (НАЧАЛА) ТЕРМОДИНАМИКИ

Термодинамика в значительной степени основывается на ряде весьма общих законов, и мы начнем с их формулировки и обсуждения.

Нулевое начало термодинамики проясняет смысл понятия равновесия: две системы, находящиеся в тепловом равновесии с третьей, будут находиться в тепловом равновесии и друг с другом.

Первое начало термодинамики утверждает сохранение энергии. Существуют две эквивалентные формулировки первого начала, которые приводятся ниже.

Первая формулировка: работа, которая совершается при переходе изолированной системой из начального состояния в конечное состояние, не зависит от типа процесса.

Эквивалентная формулировка: если система взаимодействует с окружающей средой и переходит из одного (макро)состояния в другое, то сумма изменения ее внутренней энергии  $U$  и проделанной

<sup>1</sup> В случае неполных дифференциалов обычно говорят не о дифференциале, а о приращении функции. – Прим. ред.

системой работы  $W$  равна количеству теплоты  $Q$ , поглощенной системой. В дифференциальной форме это может быть записано в виде

$$dU = -dW + dQ. \quad (5)$$

Для газа работа  $W$  связана с давлением и объемом:

$$dW = PdV. \quad (6)$$

Первое начало гарантирует баланс энергии без каких-либо ограничений на относительные изменения различных величин, обеспечивающих поток энергии. Второе начало налагает ограничение на этот поток, связанное с изменением энтропии  $dS$ , которое сопровождает приток теплоты в изолированную систему. Для квазистатического бесконечно медленного процесса изменение энтропии дается выражением

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (7)$$

и дифференциал  $dS$  положителен при поглощении системой количества теплоты  $dQ$ .

Второе начало утверждает, что энтропия теплоизолированной системы при переходе из одного (макро)состояния в другое имеет тенденцию возрастать,

$$\Delta S \geq 0. \quad (8)$$

Лишь в особом случае, а именно при обратимом квазистатическом процессе, энтропия остается постоянной, т. е.  $\Delta S = 0$ . В дополнение к общей формулировке в виде (8) приведем еще две специальные версии второго начала.

Формулировка Кельвина–Планка: невозможно создать тепловую машину, которая при непрерывной циклической работе отбирала бы теплоту от резервуара и превращала бы ее в эквивалентное количество полезной работы.

Формулировка Клаузиуса: невозможно создать идеальный холодильник, т. е. машину, вся деятельность которой сводилась бы к передаче теплоты от более холодных тел к более нагретым.

В следующем разделе мы более подробно рассмотрим «идеальные» тепловые машины, работа которых связана с так называемым циклом Карно и для которых в соотношении (8) стоит знак равенства.

Третье начало утверждает недостижимость абсолютного нуля температур. По мере приближения температуры к нулю энтропия любой системы также стремится к нулю. Нулевое начало выглядит отчасти очевидным. Первое начало, или сохранение энергии, служит основой для большей части физики. В теории относительности

этот закон обобщается на сохранение 4-вектора энергии-импульса. Второе начало устанавливает ограничения на превращение одних форм энергии в другие, особенно таких, как теплота и механическая работа. Это начало, например, не позволяет морским судам извлекать тепло непосредственно из морской воды и использовать его в качестве источника энергии для движения судна. Второе и третье начала вне термодинамики обычно используются редко.

В различных системах дифференциал работы  $dW$  записывается по-разному. Например, для газовых систем это обычно дифференциал работы при изобарическом процессе  $dW = PdV$  (6); для поверхностных пленок  $dW = -SdA$  (где  $S$  — поверхностное натяжение,  $A$  — площадь); для электрических цепей с напряжением  $V$  и зарядом  $Q$  дифференциал  $dW = -VdQ$ , а для магнитных систем  $dW = -MdB$  ( $M$  — намагниченность,  $B$  — магнитное поле). Ряд примеров в этой главе основан на использовании законов идеального газа, для которого  $dW = PdV$ .

Для обратимых процессов дифференциал количества теплоты равен  $dQ = TdS$ , причем дифференциал энтропии  $dS$  является полным, а дифференциал  $dQ$  — неполным. Изменение энтропии может быть найдено интегрированием

$$S_f - S_i = \int_i^f \frac{dQ}{T} \quad (9)$$

и выражено через удельную теплоемкость  $C$  (где  $dQ = CdT$ ) в виде

$$S_f - S_i = \int_i^f \frac{CdT}{T}. \quad (10)$$

Соответствующий расчет можно провести, используя удельные теплоемкости при постоянном объеме  $C_V$  или при постоянном давлении  $C_P$ , которые могут быть выражены через внутреннюю энергию  $U$  и энталпию  $H$ , соответственно,

$$C_V = \left( \frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (11)$$

$$C_P = \left( \frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_P. \quad (12)$$

#### 4. ТЕПЛОВАЯ МАШИНА И ЦИКЛ КАРНО

В качестве примера применения второго начала рассмотрим работу тепловой машины, которая отбирает от теплового резервуара с температурой  $T_H$  количество теплоты  $Q_H$ , совершает

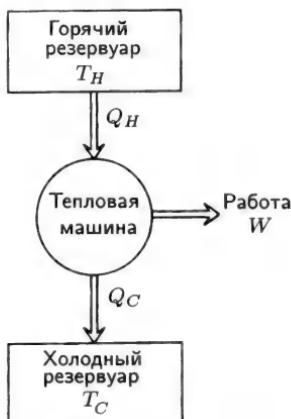


Рис. 8.1. Термодинамическая машина, работающая в цикле Карно, отбирает от горячего резервуара (с температурой  $T_H$ ) количество теплоты  $Q_H$ , производит работу  $W$  и сбрасывает количество теплоты  $Q_C$  в холодный резервуар (холодильник) с температурой  $T_C$ .

работу  $W$  и отдает теплоту  $Q_C$  холодильнику с температурой  $T_C$ , как показано на рис. 8.1. Первое начало обеспечивает сохранение энергии

$$Q_H = Q_C + W, \quad (13)$$

а второе начало налагает ограничения на изменение энтропии, имеющие вид

$$\Delta S = \frac{Q_C}{T_C} - \frac{Q_H}{T_H} \geq 0 \quad (14)$$

или

$$\frac{Q_C}{Q_H} \geq \frac{T_C}{T_H}. \quad (15)$$

Коэффициент полезного действия (КПД) тепловой машины  $\eta$  имеет вид

$$\eta = \frac{W}{Q_H}, \quad (16)$$

что с учетом выражений (13) и (15) дает неравенство

$$\eta \leq 1 - \frac{T_C}{T_H}. \quad (17)$$

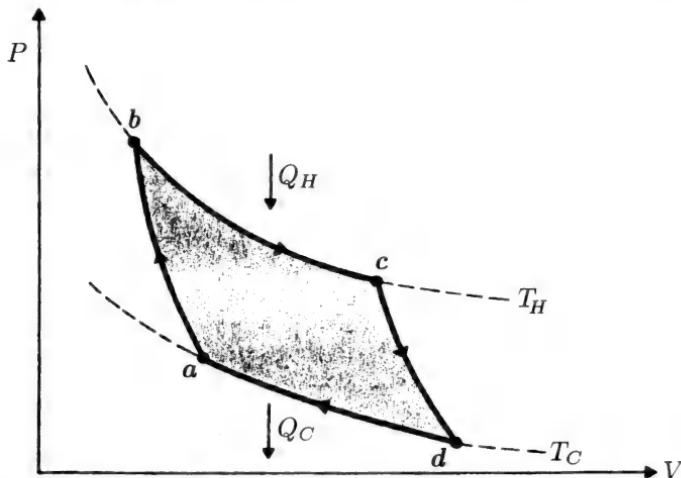


Рис. 8.2. Цикл Карно на  $P - V$ -диаграмме. Теплота подводится на верхней изотерме  $T_H$  и снимается на нижней изотерме  $T_C$ . Переходы между изотермами происходят по двум адиабатам. Ограниченнная контуром площадь соответствует выполняемой в цикле работе. (Из книги: F. Reif, Statistical Thermal Physics, McGraw-Hill, New York, 1965, p. 189.)

Максимальная эффективность тепловой машины достигается в цикле Карно с

$$\eta = 1 - \frac{T_C}{T_H}. \quad (18)$$

В этом цикле идеальный газ, используемый в качестве рабочего тела, в процессе изотермического сжатия при более высокой температуре  $T_H$  поглощает количество теплоты  $Q_H$ , затем адиабатически сжимается, выделяет в процессе изотермического расширения при температуре  $T_C$  теплоту  $W_C$  и адиабатически расширяется, возвращаясь в начальное состояние, после чего весь цикл повторяется. Работа, произведенная в таком цикле, равна площади участка на плоскости  $P, V$ , ограниченного четырьмя указанными кривыми (рис. 8.2).

## 5. ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ, ЭНТАЛЬПИЯ И СВОБОДНЫЕ ЭНЕРГИИ

Обсуждение понятий внутренней энергии, работы, теплоты и энтропии продолжается и в настоящее время. Кроме того, существу-

ют еще важные термодинамические функции, которые мы введем в этом разделе. Для этого рассмотрим систему, состояние которой изменяется обратимо и квазистатически так, что дифференциал теплоты  $dQ$  можно заменить выражением для энтропии  $TdS$ , а для подсчета работы воспользуемся законом идеального газа  $dW = PdV$ . Начнем с внутренней энергии  $U$ , которая подходит для описания процессов при постоянном объеме и поэтому широко используется физиками. Затем мы определим дополняющую ее энталпию  $H$ , которая больше подходит для описания процессов при постоянном давлении и представляет особый интерес для химиков и технологов. Свободная энергия Гельмгольца  $F$  (при постоянном объеме) и свободная энергия Гиббса  $G$  (при постоянном давлении) вводятся в связи с тем, что при заданной температуре существует лишь состояние с минимальной свободной энергией и именно свободная энергия сохраняется при фазовых переходах. В заключение мы приведем некоторые формулы (так называемые соотношения Максвелла), связывающие между собой частные производные термодинамических функций.

Первое начало

$$dU = TdS - PdV \quad (19)$$

может быть выражено через энталпию  $H$

$$H = U + PV \quad (20)$$

в следующем виде:

$$dH = TdS + VdP. \quad (21)$$

Свободная энергия Гельмгольца  $F$  и свободная энергия Гиббса  $G$  определяются выражениями

$$F = U - TS, \quad (22)$$

$$G = H - TS \quad (23)$$

и имеют, соответственно, дифференциалы

$$dF = -SdT - PdV. \quad (24)$$

$$dG = -SdT + VdP. \quad (25)$$

В разд. 14 будет показано, что свободная энергия Гельмгольца играет решающую роль в выводе законов термодинамики из уравнений статистической физики.

## 6. СООТНОШЕНИЯ МАКСВЕЛЛА

Приведенные в предыдущем разделе дифференциалы внутренней энергии  $dU$ , энталпии  $dH$ , а также свободных энергий  $dF$  и  $dG$  являются полными, и это их свойство может быть использовано для получения дифференциальных соотношений между четырьмя термодинамическими переменными ( $P$ ,  $V$ ,  $S$  и  $T$ ), от которых эти функции зависят. Так, например, внутренней энергии  $U(S, V)$  как функции энтропии и объема соответствует полный дифференциал

$$dU = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_V dS + \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_S dV. \quad (26)$$

Сравнивая это выражение с (19), легко заметить, что

$$T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_V \quad \text{и} \quad P = - \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_S. \quad (27)$$

Продифференцировав эти величины еще раз и приравняв вторые производные,

$$- \left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} \right)_{VS} = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial P \partial T} \right)_{SV} = \left( \frac{\partial P}{\partial S} \right)_V \quad (28)$$

мы приходим к соотношению Максвелла

$$\left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = - \left( \frac{\partial P}{\partial S} \right)_V, \quad (29)$$

которое одновременно является условием того, что  $dU$  представляет собой полный дифференциал в (19). Аналогичные рассуждения применительно к выражениям (21), (24) и (25) для энталпии  $H$ , свободной энергии Гельмгольца  $F$  и свободной энергии Гиббса  $G$  дают три следующих соотношения Максвелла:

$$\left( \frac{\partial T}{\partial P} \right)_S = \left( \frac{\partial V}{\partial S} \right)_P, \quad (30)$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V, \quad (31)$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P. \quad (32)$$

Вывод этих соотношений основан на том, что от величин  $U$ ,  $H$ ,  $F$  и  $G$  могут быть образованы полные дифференциалы.

## 7. ПРАВИЛО ФАЗ ГИББСА

Для равновесной системы (с количеством компонент  $c$  и фазовых состояний  $\phi$ ) число степеней свободы определяется правилом фаз Гиббса

$$f = c - \phi + 2. \quad (33)$$

Наибольший интерес представляют однокомпонентные системы ( $c = 1$ ), для которых  $f = 3 - \phi$ . Для однофазных систем ( $\phi = 1$ ) число степеней свободы  $f = 2$ , вследствие чего для однозначного определения состояния системы необходимо задать значения двух параметров. Например, для газа в качестве таких параметров можно выбрать  $P$  и  $T$ , а объем определить из уравнения состояния идеального газа или уравнения Ван-дер-Ваальса. При равновесии двухфазной системы (например, в процессе кипения)  $\phi = 2$  и, следовательно,  $f = 1$ . При этом остается только одна степень свободы, а именно, положение системы на кривой фазового перехода. Переход от одной фазы к другой может происходить в любой точке этой кривой, и поэтому уравнение Клапейрона—Клаузиса (38), приводимое ниже, может рассматриваться в качестве уравнения состояния этой межфазной границы. Наконец, тройная точка равновесия трех фаз ( $\phi = 3$ ) является выделенной, поскольку в этом состоянии вещества число степеней свободы равно нулю ( $f = 0$ ).

Раствор хлорида натрия (поваренной соли) в воде представляет собой двухкомпонентную систему  $c = 2$ . При этом одновременно с  $\text{NaCl}$  в водном растворе могут существовать фазы в форме осадка, замороженного раствора и т.п. Примерами двухкомпонентных систем служат бинарные сплавы.

## 8. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Фазовые переходы типа плавления или кипения представляют собой переход системы из одного состояния в другое при постоянной температуре, так что  $dT = 0$ . Из выражения для свободной энергии Гельмгольца (24) следует, что если фазовый переход системы происходит при постоянном объеме (изохорический процесс,  $dV = 0$ ), то свободная энергия Гельмгольца остается постоянной

$$\left. \begin{array}{l} dF = 0 \\ F = \text{const} \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{фазовый переход} \\ \text{при постоянном объеме.} \end{array} \quad (34)$$

С другой стороны, в случае фазового перехода при постоянном давлении (изобарический процесс,  $dP = 0$ ) остается постоянной свободная энергия Гиббса, и из (25) следует

$$\left. \begin{array}{l} dG = 0 \\ G = \text{const} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{фазовый переход} \\ \text{при постоянном давлении.} \end{array} \quad (35)$$

Иными словами, свободная энергия системы при таких фазовых переходах не изменяется. Например, свободная энергия Гиббса воды и льда одинакова при  $0^\circ\text{C}$  и атмосферном давлении. Процессы плавления и кипения зависят от  $T$  и  $P$ , вследствие чего можно найти такие области изменения этих переменных (называемые, соответственно, кривой плавления и кривой испарения), где присутствуют обе фазы. Например, вдоль кривой плавления свободные энергии Гиббса жидкости  $G_L$  и твердого состояния  $G_S$  равны, т. е.  $G_L = G_S$  (индексы  $L$  и  $S$  относятся к жидкой и твердой фазам, соответственно). При этом со стороны жидкой фазы  $G_L < G_S$ , а со стороны твердой фазы  $G_L > G_S$ . В тройной точке, где все три фазы (жидкая, газообразная и твердая) находятся в равновесии, величина  $G$  одинакова для всех фаз, т. е.  $G_G = G_L = G_S$ . Тройная точка — единственная у каждого вещества.

Вдоль кривой фазового перехода справедливо уравнение Клапейрона—Клаузиуса

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V}, \quad (36)$$

в котором  $\Delta S$  означает изменение энтропии, сопровождающееся при переходе изменением объема  $\Delta V$ . Вдоль кривой плавления  $\Delta V = V_L - V_S$ , причем обычно величина  $\Delta V$  положительна, о чем будет сказано ниже. При фазовом переходе первого рода, происходящем при температуре  $T_c$ , обычно выделяется скрытая теплота  $L$ , сопровождаемая изменением энтропии

$$\Delta S = \frac{L}{T_c}. \quad (37)$$

Подстановка (37) в уравнение Клапейрона—Клаузиуса приводит к соотношению

$$\frac{dP}{dT} = \frac{L}{T(V_L - V_S)}, \quad (38)$$

которое можно рассматривать в качестве уравнения состояния для кривой плавления. Твердая фаза большинства веществ плотнее жидкой, вследствие чего  $V_L > V_S$  и производная  $dP/dT$  положительна, т. е. кривая плавления имеет положительный наклон. Вода

представляет собой довольно редкое исключение: лед плавает по поверхности воды.

Если удельная теплоемкость интегрируется по достаточно широкой области, включающей один или большее число фазовых переходов, то в уравнение (10) должны быть введены дополнительные члены, учитывающие вклад скрытой теплоты этих переходов:

$$S_f - S_i = \int_i^f \frac{CdT}{T} + \sum \frac{L_j}{T_{cj}}. \quad (39)$$

Фазовые переходы второго рода не связаны с выделением скрытой теплоты, однако они могут сопровождаться скачком удельной теплоемкости, что также следует учесть при интегрировании. Нарушение непрерывности учитывается в так называемой теории усредненного поля.

## 9. УДЕЛЬНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Молекула идеального газа обладает кинетической энергией

$$KE = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2. \quad (40)$$

Вклад каждого члена в правой части в тепловую энергию составляет  $k_B T/2$ , в результате чего полная энергия равна  $3k_B T/2$  на молекулу, или  $3RT/2$  на моль (где  $R = N_A k_B$  — универсальная газовая постоянная, а  $N_A$  — постоянная Авогадро). Следовательно, внутренняя энергия идеального одноатомного газа

$$U = \frac{3}{2}RT \quad \text{идеальный газ.} \quad (41)$$

Удельная теплоемкость при постоянном объеме может быть получена из (11)

$$C_V = \frac{3}{2}R \quad \text{одноатомный газ.} \quad (42)$$

В случае двухатомного газа следует учесть дополнительную энергию  $E_{vib}$ , которая включает кинетическую и потенциальную энергию, связанную с гармонической силой  $-kx$ , направленной вдоль оси, связывающей атомы. Ее вклад равен

$$E_{vib} = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (43)$$

где  $k = m\omega^2$  и вклад каждого члена в тепловую энергию системы равен  $RT/2$ . В результате для теплоемкости получаем

$$C_V = \frac{5}{2}R \quad \text{двуатомный газ.} \quad (44)$$

Этот подход можно обобщить и на случай нелинейных многоатомных молекул, содержащих  $n$  атомов и имеющих  $(3n-6)$  нормальных колебаний, дополнительный вклад каждого из которых в тепловую энергию составляет  $RT$ . Однако на практике большинство этих колебательных мод в диапазоне температур, где измеряется удельная теплоемкость, еще не возбуждается.

Для вывода формулы удельной теплоемкости при постоянном давлении используем первое начало термодинамики

$$dQ = C_V dT + P dV \quad (45)$$

и заменим член  $P dV$  величиной, заимствованной из уравнения состояния идеального газа  $PV = RT$ , записанного в дифференциальной форме

$$P dV + V dP = R dT. \quad (46)$$

В результате получим

$$dQ = (C_V + R) dT - V dP, \quad (47)$$

что приводит к величине  $dQ/dT$  при постоянном давлении

$$C_p = C_V + R. \quad (48)$$

Следовательно, для теплоемкости газа мы получили выражения

$$C_p = \frac{5}{2}R \quad \text{одноатомный газ,} \quad (49)$$

$$C_p = \frac{7}{2}R \quad \text{двуатомный газ,} \quad (50)$$

которые хорошо согласуются с экспериментальными данными для большого числа газов.

## 10. УРАВНЕНИЕ АДИАБАТЫ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Используя формулы (42) и (49), легко получить отношение теплоемкостей идеального одноатомного газа

$$\gamma = C_p/C_V = 5/3. \quad (51)$$

Для газа, состоящего из двухатомных молекул при температурах, достаточно высоких для возбуждения колебательных мод, из (44) и (50) можно получить

$$\gamma = C_p/C_V = 7/5. \quad (52)$$

При адиабатических процессах  $dQ = 0$ , и из (47), (49) и (50) следуют выражения

$$\begin{aligned} V dP &= C_p dT, \\ P dV &= -C_V dT, \end{aligned} \quad (53)$$

отношение которых

$$\frac{dP}{P} = -\gamma \frac{dV}{V}. \quad (54)$$

Интегрируя это соотношение, мы получим уравнение адиабаты идеального газа

$$PV^\gamma = \text{const.} \quad (55)$$

Это уравнение лежит в основе экспериментального метода определения отношения удельных теплоемкостей  $\gamma$ .

## 11. УДЕЛЬНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В физике твердого тела важную роль играет дебаевская температура  $\Theta_D$ , выше которой происходит возбуждение большинства нормальных колебаний. При высоких температурах ( $T \gg \Theta_D$ ) каждый атом может совершать колебания вдоль осей  $x$ ,  $y$  или  $z$ , причем вклад каждой колебательной моды в удельную теплоемкость равен  $RT$ , т. е.

$$C_V \approx C_P = 3R \quad \text{при} \quad T \gg \Theta_D. \quad (56)$$

Этот факт был давно известен экспериментаторам под названием закона Дюлонга и Пти. Незначительное различие теплоемкостей  $C_V$  и  $C_P$  у твердых тел объясняется слабым влиянием давления на объем. Колебания такого типа называют фононными модами, и связанную с ними удельную теплоемкость часто называют фононной.

При строгом подходе исходным моментом построения дебаевской теории удельной теплоемкости является запись выражения для полной колебательной энергии  $U$  единицы объема с использованием дебаевского приближения  $\omega = kv$ , результирующей плотности фононных состояний  $D_{ph}(\omega) = \omega^2/2\pi^2v^3$  и распределения Ферми—Дирака  $f(\omega)$ , [формула (56) гл. 9]:

$$U = \int \hbar\omega D_{ph}(\omega) f(\omega) d\omega = \quad (57)$$

$$= \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \frac{\omega^2}{2\pi^2v^3} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega. \quad (58)$$

Дифференцируя это выражение по  $T$ , получаем

$$C_V = 9R \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\omega_D} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (59)$$

где  $x = \beta\hbar\omega$  и  $x_D = \hbar\omega/k_B\Theta_D$ . Интеграл можно взять точно в низкотемпературном пределе  $x_D \gg \infty$ , а в высокотемпературной области можно воспользоваться приближением  $e^x \approx 1+x$ . Это дает

$$C_V \approx \frac{12\pi^4}{5}R\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \quad \text{при } T \ll \Theta_D, \quad (60)$$

$$C_V \approx 3R \quad \text{при } T \gg \Theta_D, \quad (61)$$

что подтверждается экспериментом. Результат (61), соответствующий классическому пределу, называется законом Дюлонга и Пти.

Если твердое тело является проводником, то при низких температурах (т. е. при  $T \ll T_F$ , где

$$T_F = E_F/k_B \quad (62)$$

есть температура Ферми, выраженная через энергию Ферми  $E_F$ ) вклад электронов проводимости  $C_e$  в удельную теплоемкость линейно зависит от температуры

$$C_e = \gamma T. \quad (63)$$

Для многих металлов эта величина близка к значению для свободных электронов

$$C_e = \frac{1}{2}\pi^2R(T/T_F), \quad (64)$$

для которых температура Ферми  $T_F$  обычно составляет несколько тысяч градусов. В области низких температур ( $T \ll \Theta_D$  и  $T_F$ ) полная удельная теплоемкость твердого тела  $C_{\text{полн}}$  содержит вклады электронов (64) и колебаний решетки (60)

$$C_{\text{полн}} = \gamma T + AT^3, \quad (65)$$

согласно дебаевской теории коэффициент  $A = 234R/\Theta_D^3$ . Коэффициенты  $\gamma$  и  $A$  можно оценить экспериментально по точке интерсепта и наклону на графике зависимости  $C_{\text{полн}}/T$  от  $T^2$ , соответственно.

## 12. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ

Начнем с замечаний относительно теплопроводности, а затем рассмотрим тепловые эффекты, зависящие от наличия электрических или магнитных полей.

Плотность теплового потока  $\mathbf{U}$  (равная потоку тепловой энергии в единицу времени через единичное сечение) характеризует перенос со скоростью  $\mathbf{v}$  плотности энтропии  $S_\phi$

$$\mathbf{U} = TS_\phi\mathbf{v} = -k_{th}\nabla T, \quad (66)$$

где использован закон Фурье

$$\mathbf{U} = -k_{th} \nabla T, \quad (67)$$

а  $k_{th}$  — коэффициент теплопроводности. Обычно металлы хорошо проводят тепло в соответствии с законом Видемана—Франца [формула (18) гл. 24], согласно которому перенос тепла электронами и фононами происходит независимо, и соответствующие теплопроводности просто складываются:  $k_{th} = k_e + k_{ph}$ . В незамкнутом проводнике с градиентом температуры возникает электрическое поле, направленное либо по градиенту (так называемая термоэдс, или эффект Зеебека), либо перпендикулярно направлению градиента (эффект Нернста). При изотермическом протекании электрического тока возможно возникновение теплового потока, направленного как параллельно электрическому току (эффект Пельтье), так и перпендикулярно ему (эффект Эттингсхаузена). При наличии магнитного поля возникают еще два «поперечных» эффекта. Тепловой аналог эффекта Холла называется эффектом Риги—Ледюка. На рис. 8.3 показаны методы регистрации и измерения различных эффектов, а в табл. 8.1 систематизированы их характеристики. Ниже дано краткое описание физической картины этих явлений.

Эффект Зеебека (рис. 8.3, а). В проводнике без тока при наличии градиента температуры  $\nabla T$  может возникнуть постоянное электрическое поле

$$\mathbf{E} = S \nabla T \quad (68)$$

в направлении градиента, которое в свою очередь создаст электростатическую разность потенциалов ( $V_2 - V_1$ ), равную

$$V_2 - V_1 = S(T_2 - T_1). \quad (69)$$

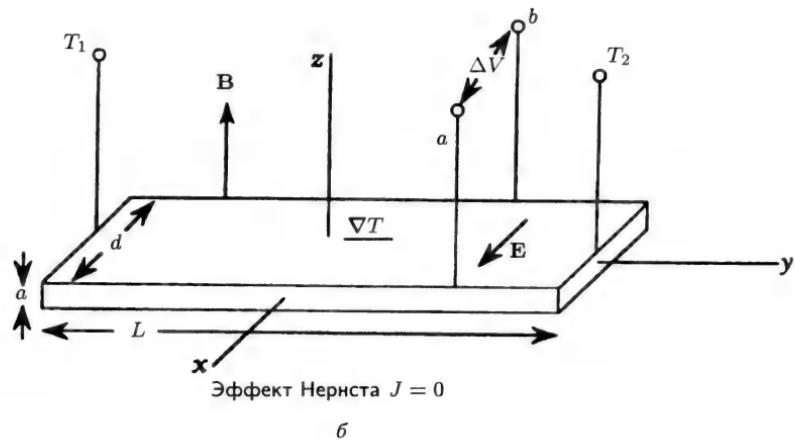
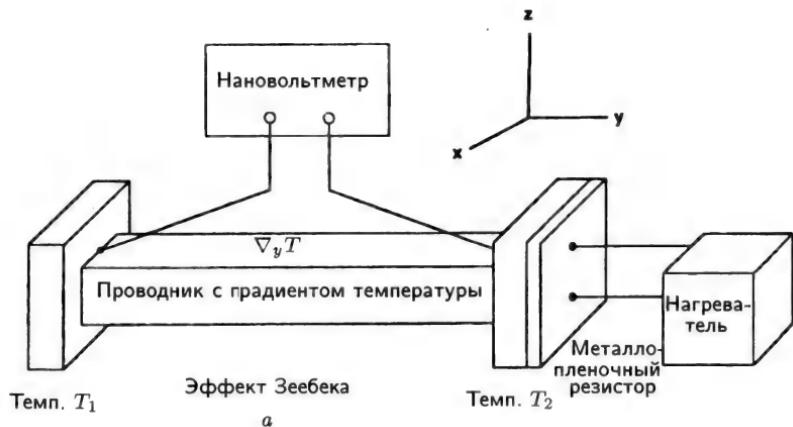
Величину  $S$  называют по-разному: термоэдс, коэффициент термоэдс, коэффициент Зеебека. Разумеется, не следует смешивать эту величину с переносом энтропии, который обозначается  $S_\phi$ . В приближении свободных электронов имеем для  $S$  выражение

$$S = \left( \frac{\pi^2}{2} \right) \left( \frac{k_B}{e} \right) \left( \frac{T}{T_F} \right) = \quad (70)$$

$$= 142(T/T_F) \text{ мкВ/К}, \quad (71)$$

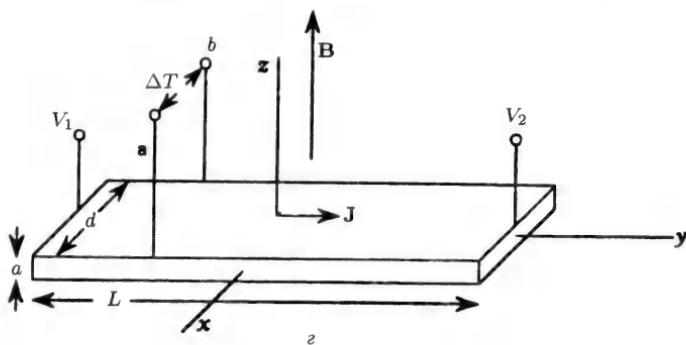
где температура Ферми  $T_F$  (62) обычно составляет  $10^4 - 10^5$  К.

Эффект Нернста (рис. 8.3, б). В проводнике без тока при наличии градиента температуры  $\nabla T$  и магнитного поля  $\mathbf{B}$  возникает постоянное электрическое поле  $E_x = dV/dx$ , направленное перпендикулярно градиенту. Это, в свою очередь, создает падение напря-

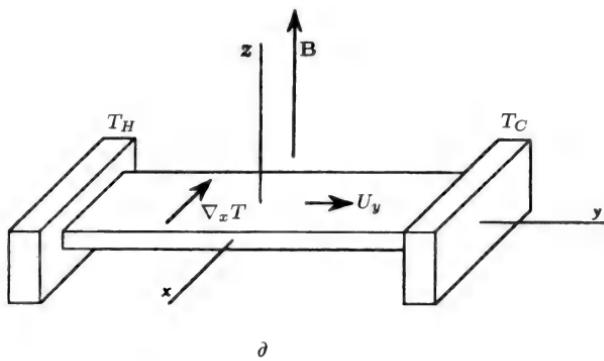


Эффект Пельтье

6



Эффект Эттингсхаузена



Эффект Риги-Ледюка

Рис. 8.3. Схема регистрации различных термодэлектрических и термомагнитных эффектов. (Из книги: C. P. Poole, Jr *et al.*, Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, ch. 14.)

жения  $\Delta V$  в направлении поперек образца шириной  $d$ . Величина  $\Delta V$  равна

$$\Delta V = -Q B d \nabla T, \quad (72)$$

где коэффициент  $Q$  называется коэффициентом Нернста.

Эффект Пельтье (рис. 8.3, б). Если по проводнику, находящемуся при постоянной температуре, протекает постоянный электрический ток с плотностью  $J$ , то в проводнике возникает тепловой поток с плотностью  $U$ , отводящий джоулево тепло, которое выделяется то-

**Таблица 8.1.** Термоэлектрические и термомагнитные явления. Внешнее воздействие прилагается вдоль оси  $y$ ; продольные эффекты измеряются также вдоль оси  $y$ ; поперечные эффекты измеряются вдоль оси  $x$ ; в большинстве случаев магнитное поле налагается вдоль оси  $z$ .

Эффект	Электрическое поле ( $E$ или $\nabla V$ )	Электрический ток ( $I$ )	Градиент температуры ( $\nabla T$ )	Тепловой поток ( $dQ/dt$ )	Магнитное поле $B$	Рисунок
Удельное сопротивление	измер. вдоль оси $y$	вдоль оси $y$	0	—	0	—
Магнитное сопротивление (продольное)	измер. вдоль оси $y$	вдоль оси $y$	0	—	прилож. вдоль оси $y$	—
Магнитное сопротивление (поперечное)	измер. вдоль оси $y$	вдоль оси $y$	0	—	прилож. вдоль оси $z$	—
Теплопроводность	—	0	измер. вдоль оси $y$	прилож. вдоль оси $y$	0	—
Эффект Холла	измер. вдоль оси $x$	вдоль оси $y$	0	—	прилож. вдоль оси $z$	гл. 24, формула (14)
Эффект Риги—Ледюка	—	0	измер. вдоль оси $x$	прилож. вдоль оси $y$	прилож. вдоль оси $z$	8.3,д
Эффект Зеебека	измер. вдоль оси $y$	0	прилож. вдоль оси $y$	—	0	8.3,а
Магнитный эффект Зеебека	измер. вдоль оси $y$	0	прилож. вдоль оси $y$	0	прилож. вдоль осей $x, y$ или $z$	—
Эффект Нернста	измер. вдоль оси $x$	0	прилож. вдоль оси $y$	—	прилож. вдоль оси $z$	8.3,б
Магнитный эффект Нернста	измер. вдоль оси $x$	0	прилож. вдоль оси $y$	—	прилож. вдоль осей $x, y$ или $z$	—
Эффект Пельтье	—	вдоль оси $y$	0	измер. вдоль оси $y$	—	8.3,в
Эффект Эттингсхаузена	—	вдоль оси $y$	измер. вдоль оси $x$	—	прилож. вдоль оси $z$	8.3,г

ком. Величины  $U$  и  $J$  связаны между собой коэффициентом Пельтье  $\pi_p$ :

$$U = \pi_P J. \quad (73)$$

Кроме этого, существует еще соотношение Томсона (lord Кельвин), которое имеет вид

$$\pi_P = ST \quad (74)$$

и связывает температуру, коэффициент Пельтье  $\pi_P$  и термоэдс  $S$ .

Эффект Эттингсхаузена (рис. 8.3,2). Если по проводнику, помещенному в магнитное поле и имеющему постоянную температуру в продольном направлении протекает постоянный электрический ток с плотностью  $J_y$ , то в этом проводнике возникает градиент температуры  $dT/dx$  (что вызывает соответствующий поток тепловой энергии), перпендикулярный направлению тока и равный

$$|dT/dx| = \epsilon J_y B_z, \quad (75)$$

где  $\epsilon$  — коэффициент Эттингсхаузена.

Эффект Риги—Ледюка (рис. 8.3,д). Этот эффект возникает при нагреве одного из концов образца, создающем градиент температуры  $\nabla_y T$  и тепловой поток с плотностью  $U_y$  в направлении  $y$  от горячего конца к холодному. Перпендикулярное магнитное поле  $B$  в направлении  $z$  создает градиент температуры  $\nabla_x T$  в направлении поперек проводника, равный

$$\nabla_x T = R_L B U_y, \quad (76)$$

где  $R_L$  — коэффициент Риги—Ледюка.

Закон Видемана—Франца [формула (18), гл. 24] связывает  $R_L$  с коэффициентом Холла  $R_H$ :

$$R_H = R_L L_0 T, \quad (77)$$

где  $L_0 = (3/2)(k_B/e)^2$  — число Лоренца. По аналогии с обычным эффектом Холла можно определить и так называемый тепловой угол Холла  $\Theta_{th}$

$$\operatorname{tg} \Theta_{th} = \nabla_x T / \nabla_y T. \quad (78)$$

## 13. ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ТЕМПЕРАТУРЫ

Бесконечное значение температуры соответствует равной заселенности всех энергетических уровней, поскольку отношение заселеностей ( $N_1$  и  $N_2$ ) двух уровней дается выражением

$$N_1/N_2 = e^{-\Delta E/k_B T}, \quad (79)$$

где  $\Delta E = E_2 - E_1$ ;  $N_2 \approx N_1$  при  $k_B T \gg \Delta E$ . В противоположном случае (при  $T \rightarrow 0$ ) все атомы находятся в низшем энергетическом состоянии.

Наличие высокой заселенности состояний с более высокой энергией означает, что температура отрицательна, и если все атомы находятся на самом высоком уровне,  $T$  соответствует  $-0$  («отрицательному нулю»). Таким образом, системы с отрицательными температурами всегда «горячее» систем с положительными температурами, а самому «горячему» состоянию отвечает  $T = -0$ .

Отрицательные температуры могут встречаться у систем с конечным числом энергетических состояний. Принцип работы мазеров и лазеров основан именно на создании систем с отрицательными температурами с избыточной заселенностью высших энергетических состояний, с которых происходит спонтанное излучение.

## 14. СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Одной из важнейших характеристик системы в статистической механике является функция распределения  $Z$ , которую также называют суммой по состояниям

$$Z = \sum e^{-\beta E}, \quad (80)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ , а суммирование ведется по всем энергетическим состояниям системы. Свободная энергия Гельмгольца связана с  $Z$  соотношением

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (81)$$

а внутренняя энергия

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (82)$$

Выражения для  $F$  и  $U$  позволяют затем выразить через  $Z$  энтропию  $S$  и величины  $H$  и  $G$ , используя для этого формулы (22), (20) и (23), соответственно. Формулы (81)–(82) удобны для вычисления термодинамических характеристик систем, для которых функция распределения  $Z$  известна или может быть вычислена.

## ГЛАВА 9

---

# СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Статистическая физика (или статистическая механика) изучает системы, состоящие из большого числа частиц. Обычно это число столь велико, что проследить движение отдельной частицы просто невозможно, вследствие чего применяются статистические методы, позволяющие получить усредненные характеристики системы. Могут быть построены функции распределения (например, распределение молекул газа по скоростям или распределение электронов по энергетическим уровням), которые затем используются для вычисления средних значений интересующих нас величин. В конце предыдущей главы уже отмечалось, что существует функция распределения  $Z$  (называемая также суммой по состояниям), которую можно использовать для вычисления термодинамических величин (естественно, что эти величины будут усредненными). Например, давление газа на стенки сосуда создается за счет столкновения с ними молекул газа. Поскольку молекулы могут иметь различные скорости (высокие, средние, низкие), давление можно вычислить, зная распределение по скоростям.

Статистическая механика допускает и иной подход, заключающийся в рассмотрении поведения целого набора или ансамбля идентичных (т. е. одинаково «приготовленных») систем, а затем проведении усреднения в пределах ансамбля. Например, вероятность выпадения четверки при выбросе двух игральных костей можно оценить статистически, бросив 1000 пар одинаковых игральных костей, которые хаотически перемешиваются (это и означает одинаковое «приготовление»), и подсчитав число выпавших в ансамбле четверок. В общем случае предполагается, что одинаково «приготовленные» системы, состоящие из большого числа частиц, демонстрируют одинаковое поведение.

В рассматриваемом ансамбле каждая пара игральных костей является отдельной системой, причем в каждой паре кости могут быть одинаковы (неразличимы) или различимы благодаря различию в окраске или размере. В классической механике системы содержат различимые частицы, вследствие чего мы можем в принципе проследить за отдельной частицей. В противоположность этому квантовомеханические частицы принципиально неразличимы — они делятся на два класса, а именно: частицы с целочисленным спином ( $S = 0, 1, 2, \dots$ ), и частицы с полуцелым спином ( $S = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ). Позднее мы увидим, что эти типы частиц подчиняются разным законам заполнения допустимых энергетических состояний, вследствие чего заселенность энергетических уровней частицами разного типа описывается различными функциями распределения.

В основе статистической механики лежит фундаментальное предположение о равенстве априорных вероятностей. Более точно это можно сформулировать в следующем виде: в равновесной изолированной системе с равной вероятностью заполняются все допустимые энергетические состояния. Заполнение теоретически допустимых состояний может быть ограничено дополнительными условиями, связанными, например, с энергией или температурой. Еще одно важное допущение состоит в том, что усреднение по времени для системы можно заменить усреднением по ансамблю.

## 2. МИКРОКАНОНИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ

Мы начнем с ограничений числа допустимых состояний системы, обусловленных ее энергией. Пусть, например, изолированная система состоит из  $N$  частиц в фиксированном объеме  $V$ , которые могут занимать большое число уровней с энергиями  $E_i$  ( $i$  обозначает номер уровня). Если энергия системы ограничена узким диапазоном значений от  $E_0$  до  $E_0 + dE$ , т. е.

$$E_0 \leq E \leq E_0 + dE, \quad (1)$$

то вероятность  $P_i$  найти систему в конкретном состоянии  $i$  равна

$$P_i = \begin{cases} C & \text{для } E_0 \leq E \leq E_0 + dE, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (2)$$

Постоянную  $C$  можно определить из условий нормировки

$$\sum P_i = 1, \quad (3)$$

поскольку сумма вероятностей по всем допустимым состояниям, удовлетворяющим условию (2), должна равняться единице. Набор, или ансамбль этих допустимых состояний называется микроканоническим ансамблем. Обычно его используют в случае узкого интервала энергии или изолированных систем без учета тепловых эффектов.

Число состояний, приходящихся на соответствующий интервал энергии, называют плотностью состояний  $D(E)$ , причем предполагается, что для микроканонического ансамбля она имеет одно и тоже значение  $D(E_0)$  во всем интервале (1) и равна нулю вне этого интервала. Вырожденные состояния (т. е. различающиеся состояния с одной и той же энергией) считаются при этом отдельными состояниями.

### 3. КАНОНИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ

Канонический ансамбль характеризуется определенной температурой  $T$ . Если ансамбль находится в контакте с тепловым резервуаром, имеющим температуру  $T$ , то заселенность уровней перераспределится таким образом, что уровни с низкой энергией окажутся более заселенными, чем уровни с высокой энергией. Если система имеет лишь два энергетических уровня ( $E_1$  и  $E_2$ ), то их заселенности  $N_1$  и  $N_2$  будут связаны друг с другом соотношением Больцмана

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp[-\beta(E_2 - E_1)], \quad (4)$$

где

$$\beta = 1/k_B T \quad (k_B \text{ — постоянная Больцмана}). \quad (5)$$

Отношение заселенностей  $N_2/N_1$  совпадает с отношением вероятностей  $P_2/P_1$  заполнения уровней

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{N_2}{N_1}. \quad (6)$$

Если эти энергетические уровни имеют соответствующее вырождение ( $g_1$  и  $g_2$ ), то формула (4) переходит в

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp[-\beta(E_2 - E_1)]. \quad (7)$$

Однако в дальнейшем рассмотрении мы не будем учитывать вырождение. Типичными примерами такого вырождения состояний могут служить вырождение по спину электрона  $g_S = 2$ , отвечающее двум значениям проекции спина ( $M_S = \pm 1/2$ ), или вырождение

$g_L = 2L+1$ , отвечающее проекциям орбитального момента. Наложение магнитного поля, естественно, снимает подобное вырождение.

Ансамбль называется каноническим, если относительные заселенности  $N_i$  и  $N_j$  любой пары состояний ( $i$  и  $j$ ) этого ансамбля связаны между собой соотношением Больцмана (4), что одновременно означает и наличие единой температуры у всей системы.

Вероятность заселения состояния  $i$  в каноническом ансамбле может быть записана в виде

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}. \quad (8)$$

Сумма вероятностей нормирована на единицу

$$\sum P_i = 1, \quad (9)$$

а знаменатель  $Z$  в (8), равный

$$Z = \sum e^{-\beta E_i}, \quad (10)$$

называется функцией распределения или суммой по состояниям. Выражение (8) можно рассматривать в качестве определения канонического ансамбля.

Средняя энергия по каноническому ансамблю дается формулой

$$\langle E \rangle = \frac{\sum e^{-\beta E_i} E_i}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (11)$$

Кроме этого, иногда используются выражения для среднего квадрата энергии

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (12)$$

и для величины

$$\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}, \quad (13)$$

называемой дисперсией, которая характеризует разброс по энергии.

#### 4. БОЛЬШОЙ КАНОНИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ

Выше мы рассматривали изолированные системы с определенными энергией и числом частиц (микроканонические ансамбли) или системы с определенными температурой и числом частиц, которые могли обмениваться энергией с тепловым резервуаром (канонические ансамбли). В обоих случаях подразумевалось, что число частиц остается постоянным. Между тем, многие физические системы, находящиеся в контакте с резервуаром, могут обмениваться с

ним не только теплом, но и частицами, в результате чего число частиц в системе может изменяться. Такие системы принято описывать большим каноническим распределением, в котором вероятность заполнения  $P_i$  уровня с энергией  $E_i$  равна

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i - \alpha N_i}}{\sum e^{-\beta E_i - \alpha N_i}}. \quad (14)$$

При этом средняя энергия  $\langle E \rangle$  и среднее число частиц  $\langle N \rangle$  определяются, соответственно, выражениями

$$\langle E \rangle = \frac{\sum e^{-\beta E_i - \alpha N_i} E_i}{\sum e^{-\beta E_i - \alpha N_i}}, \quad (15)$$

$$\langle N \rangle = \frac{\sum e^{-\beta E_i - \alpha N_i} N_i}{\sum e^{-\beta E_i - \alpha N_i}}. \quad (16)$$

Величина  $\alpha$  иногда записывается через химический потенциал  $\mu$ :

$$\alpha = -\mu/k_B T; \quad (17)$$

$\mu$  можно рассматривать в качестве термодинамической функции, связанной со свободной энергией Гиббса  $F$  соотношением

$$dF = -SdT - PdV - \mu dN, \quad (18)$$

которое представляет собой обобщение формулы (24) гл. 8. Используя (18), можно получить полезные выражения

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N}, \quad (19)$$

$$P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N}, \quad (20)$$

$$\mu = - \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V}, \quad (21)$$

а также ввести понятие термодинамического потенциала  $\Omega$ :

$$\Omega = F - \mu N. \quad (22)$$

Большой канонический ансамбль используется при описании систем, в которых число частиц может изменяться, как, например, при химических реакциях типа



в которой три молекулы реагируют, образуя две молекулы продукта, и полное число частиц  $N$  в системе не сохраняется.

## 5. ТЕРМОДИНАМИКА

Статистическую механику связывает с термодинамикой функция распределения (10). Мы уже приводили выше выражение для средней энергии  $\langle E \rangle$ , которую можно отождествить в термодинамике с внутренней энергией  $U$  [см. формулу (82) гл. 8], т. е.

$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (24)$$

Свободная энергия Гельмгольца  $F$  и энтропия  $S$  могут быть выражены через функцию  $Z$ :

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (25)$$

$$S = k_B \left( \ln Z - \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right). \quad (26)$$

Последнее выражение получено с учетом определения свободной энергии Гельмгольца

$$F = U - TS. \quad (27)$$

Аналогично можно легко получить и остальные выражения из всего списка фундаментальных термодинамических функций (см. разд. 4, гл. 8), т. е. энталпию  $H$  и свободную энергию Гиббса

$$H = U + PV, \quad (28)$$

$$G = H - TS. \quad (29)$$

Таким образом, если функция распределения системы известна, то это в принципе позволяет рассчитать все ее термодинамические свойства и характеристики. Далее в этом разделе мы не будем учитывать возможность изменения в системе числа частиц, как это было сделано при выводе выражения для свободной энергии Гельмгольца.

В качестве примера рассмотрим гармонический осциллятор, уровням которого соответствуют энергии

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (30)$$

приводящие к следующей функции распределения:

$$\begin{aligned} Z &= \sum \exp[-\beta \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega] = \\ &= e^{-\beta \hbar\omega/2} [1 + e^{-\beta \hbar\omega} + e^{-2\beta \hbar\omega} + \dots] = \end{aligned} \quad (31)$$

$$= \frac{e^{-\beta \hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta \hbar\omega}}. \quad (32)$$

Используя (11), можно получить значение средней энергии

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \right\} \quad (33)$$

$$\approx \begin{cases} k_B T, & \text{если } \hbar\omega \ll k_B T, \\ \frac{1}{2} \hbar\omega, & \text{если } \hbar\omega \gg k_B T. \end{cases} \quad (34a)$$

$$\approx \begin{cases} k_B T, & \text{если } \hbar\omega \ll k_B T, \\ \frac{1}{2} \hbar\omega, & \text{если } \hbar\omega \gg k_B T. \end{cases} \quad (34b)$$

Этот результат используется в теории Дебая при вычислении удельной теплоемкости. В классическом, или высокотемпературном, пределе в соответствии с теоремой о равнораспределении энергии вклад каждого квадратичного члена гамильтониана в энергию системы составляет  $k_B T/2$ . В гамильтониане гармонического осциллятора присутствует два таких члена,  $mv^2/2$  и  $kx^2/2$ , что и приводит к полному значению  $k_B T$  в (34a) при высоких температурах.

## 6. ПАРАМАГНЕТИЗМ

Атом или ион, обладающий моментом  $\hbar\mathbf{J} = \hbar\mathbf{L} + \hbar\mathbf{S}$ , имеет также магнитный момент  $\mu$

$$\mu = \gamma \hbar \mathbf{J} = g \mu_B \mathbf{J}, \quad (35)$$

где  $\gamma$  — гиromагнитное отношение,  $g$  — безразмерный  $g$ -фактор,  $\mu_B = e\hbar/2m$  — магнетон Бора; эти величины связаны соотношением

$$g\mu_B = \gamma\hbar. \quad (36)$$

В магнитном поле  $\mathbf{B}$  энергия взаимодействия, отвечающая проекции момента  $m_J$ , равна

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B} = g\mu_B m_J B. \quad (37)$$

Для свободного электрона  $L = 0$ ,  $J = S = \frac{1}{2}$ , и энергия взаимодействия магнитного момента с полем  $B$  равна  $\pm \frac{1}{2}g\mu_B B$ .

Парамагнетизм обусловлен ансамблем спинов, которые взаимодействуют с внешним полем, не взаимодействуя между собой. Величине  $S = \frac{1}{2}$  соответствуют два энергетических уровня  $\pm \frac{1}{2}g\mu_B B$ , функция распределения

$$Z = e^{-\frac{1}{2}g\mu_B B\beta} + e^{\frac{1}{2}g\mu_B B\beta}, \quad (38)$$

и средний магнитный момент

$$\langle \mu \rangle = \frac{-\frac{1}{2}g\mu_B e^{-\frac{1}{2}g\mu_B B\beta} + \frac{1}{2}g\mu_B e^{\frac{1}{2}g\mu_B B\beta}}{Z} \approx \quad (39)$$

$$\approx \frac{g^2\mu_B^2 S(S+1)B}{3k_B T}, \quad g\mu_B B \ll k_B T. \quad (40)$$

Коэффициент  $S(S+1)$  в числителе позволяет учесть более высокие значения спина, т. е.  $S \geq \frac{1}{2}$ . Подставляя функцию распределения (38) в (39), можно найти, что намагниченность  $M$  (магнитный момент единицы объема) есть

$$M = \frac{1}{2}g\mu_B N \operatorname{th} \left( \frac{1}{2}g\mu_B B/k_B T \right), \quad (41)$$

а в высокотемпературном пределе для  $S \geq \frac{1}{2}$

$$M \approx \frac{Ng^2\mu_B^2 S(S+1)B}{3k_B T}, \quad g\mu_B B \ll k_B T, \quad (42)$$

где  $N$  — число спинов в единице объема. Легко можно вычислить значение магнитной восприимчивости  $\chi = \mu_0 M/B$ .

Картина усложняется при наличии орбитального движения, когда квантовое число  $S$  заменяется на  $J$ . В этом случае (41) содержит так называемую функцию Бриллюэна  $B_J(x)$ , которая (как показано во многих учебниках по физике твердого тела) равна

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \left( \frac{(2J+1)x}{2J} \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \left( \frac{x}{2J} \right), \quad (43)$$

где

$$x = gJ\mu_B B/k_B T, \quad (44)$$

вследствие чего намагниченность приобретает вид

$$M = NgJ\mu_B B_J(x). \quad (45)$$

В высокотемпературном пределе и при  $J = S$  это выражение упрощается и переходит в (42).

## 7. ЭНТРОПИЯ И АДИАБАТИЧЕСКОЕ РАЗМАГНИЧИВАНИЕ

Энтропия характеризует степень хаотичности заполнения в системе допустимых уровней энергии. Обозначим через  $\Omega(E)$  число допустимых уровней системы с энергией  $E$ . В статистике энтропия

$S$  пропорциональна натуральному логарифму от числа уровней, а именно

$$S = k_B \ln \Omega. \quad (46)$$

Абсолютную температуру системы можно выразить через  $\Omega$ , воспользовавшись соотношением

$$\frac{1}{k_B T} = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}. \quad (47)$$

В качестве примера практической пользы приведенного определения энтропии можно рассмотреть систему  $N$  невзаимодействующих спинов, для каждого из которых допустимы  $(2J+1)$  состояний, вследствие чего система вырождена. Согласно (46), энтропия системы спинов равна

$$S = k_B \ln(2J+1)^N = N k_B \ln(2J+1). \quad (48)$$

При наложении магнитного поля вырождение по спину снимается. В результате низшие энергетические уровни окажутся более заселенными, чем верхние, и энтропия системы уменьшится. Если температура системы возрастет настолько, что тепловая энергия  $k_B T$  значительно превысит магнитное расщепление уровней (т. е.  $k_B T \gg g\mu_B B$ ), то энтропия достигает своего максимального значения (48). В противном случае, если тепловая энергия намного меньше энергии магнитного расщепления уровней ( $k_B T \ll g\mu_B B$ ), все спины займут состояние с наименьшей магнитной энергией. В пределе  $k_B T/g\mu_B B \rightarrow 0$  доступно только одно состояние, в результате чего  $\Omega \rightarrow 1$  и  $S \rightarrow 0$  [это следует из формулы (46), полученной выше в соответствии с третьим началом термодинамики].

Количественный расчет показывает, что при наличии магнитного поля зависимость энтропии парамагнитного образца от температуры имеет вид, изображенный на рис. 9.1. Наложение поля, как указывалось, уменьшает энтропию, причем уменьшение тем сильнее, чем больше поле. Это происходит потому, что с увеличением магнитного поля возрастает расщепление зеемановских подуровней. Если поле включается в изотермических условиях при температуре  $T_i$ , то система переходит из точки  $a$  в точку  $b$ , магнитные моменты атомов перераспределяются по зеемановским подуровням (в соответствии с постоянной Больцмана) для температуры  $T_i$ , и энтропия системы уменьшается. Если при сохранении теплоизоляции образца адиабатически снять магнитное поле, то (поскольку энтропия системы не может изменяться) система перейдет из точки  $b$  в точку  $c$ , т. е. произойдет понижение температуры до некоторого значения  $T_f$ . Это явление называется адиабатическим размагничиванием и используется на практике для достижения очень низких температур.

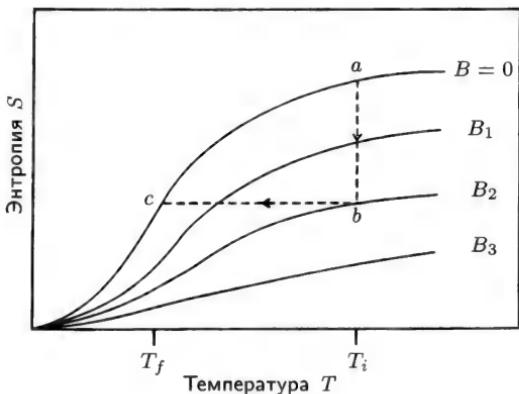


Рис. 9.1. Зависимость от температуры энтропии парамагнитной системы спинов. Изотермическое намагничивание при переходе  $a \rightarrow b$  уменьшает энтропию, а адиабатическое размагничивание при переходе  $b \rightarrow c$  понижает температуру системы спинов.

## 8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МАКСВЕЛЛА

Одним из важнейших результатов статистической механики является вывод выражения для распределения молекул газа по скоростям в простейшем случае, когда молекулы не взаимодействуют друг с другом и каждая обладает только кинетической энергией, равной  $mv^2/2$ . Независимые составляющие кинетической энергии, соответствующие движению в направлении осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , согласно теореме о равнораспределении энергии, равны  $k_B T/2$ ; в результате полная тепловая энергия каждой молекулы равна  $3k_B T/2$ . Число молекул в единице объема со скоростями в интервале  $(v, v + dv)$  определяется выражением

$$F(v)dv = 4\pi\rho \left\{ \frac{m}{2\pi k_B T} \right\}^{3/2} v^2 \exp[-mv^2/2k_B T]dv, \quad (49)$$

где  $\rho$  — плотность (число частиц в единице объема), и

$$\int_0^\infty F(v)dv = \rho. \quad (50)$$

Функция  $F(v)$ , называемая распределением Максвелла, приведена на рис. 9.2 для трех различных значений температуры. Газ с таким распределением молекул по скоростям подчиняется классической статистике или статистике Максвелла—Больцмана (МБ). Средняя

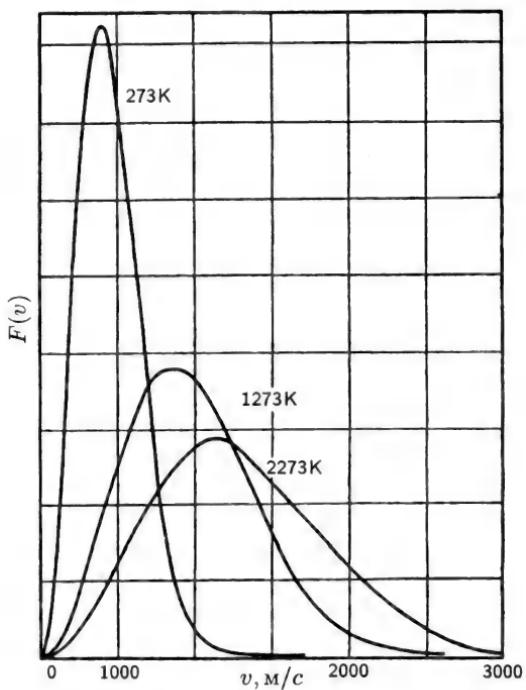


Рис. 9.2. Максвелловское распределение по скоростям при трех значениях температуры. (Из книги: W. J. Moore, Physical Chemistry, Prentice-Hall, 1955, Fig. VII-12.)

скорость в распределении Максвелла равна нулю,  $\langle v \rangle = 0$ , поскольку положительные и отрицательные значения у каждой составляющей скорости появляются с одинаковой частотой. Значение скорости  $v_{\max}$ , соответствующей максимуму кривой распределения (эту скорость называют также наиболее вероятной), равно

$$v_{\max} = (2k_B T/m)^{1/2}. \quad (51)$$

Среднеквадратичную скорость  $v_{ms}$  можно найти интегрированием (с использованием гамма-функции):

$$\langle v^2 \rangle = \frac{1}{\rho} \int F(v) v^2 dv = 3k_B T/m, \quad (52)$$

$$v_{ms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = (3k_B T/m)^{1/2}. \quad (53)$$

## 9. КЛАССИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

Использованная в предыдущем разделе статистика Максвелла—Больцмана приложима к частицам, которые считаются различимыми. Она применима для описания систем, в которых можно говорить об «индивидуальности» каждого атома заданного типа и в которых нет ограничений на число частиц в отдельном состоянии типа состояния с определенной энергией. Перестановка двух частиц не влияет на волновую функцию системы, поскольку эта функция не имеет каких-либо ограничений, связанных с требованиями симметрии.

В квантовой статистике частицы неразличимы, и их можно разделить на два класса. Частицы с целочисленным спином ( $S = 0, 1, 2, \dots$ ) называются бозонами и имеют симметричные волновые функции, которые не меняют знака при перестановке двух частиц

$$\Psi(r_1 r_2 r_3 \dots) = \Psi(r_2 r_1 r_3 \dots). \quad (54)$$

На число частиц, находящихся в каждом состоянии, при этом не налагается никаких ограничений. Про системы таких частиц говорят, что они подчиняются статистике Бозе—Эйнштейна (БЭ). Ко второму классу систем принадлежат частицы с полуцелым спином ( $S = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ), которые называют фермионами. Их волновые функции антисимметричны по отношению к перестановке частиц, т. е.

$$\Psi(r_1 r_2 r_3 \dots) = -\Psi(r_2 r_1 r_3 \dots) \quad (55)$$

Про системы частиц такого типа говорят, что они подчиняются статистике Ферми—Дирака (ФД), в соответствии с которой две частицы не могут находиться в одинаковом квантовом состоянии. Другими словами, частицы ФД подчиняются принципу запрета Паули. В формулах (54) — (55) каждой частице соответствует вектор  $r_i$ . В действительности каждая частица обладает набором дополнительных квантовых чисел, например, соответствующих ее орбитальному ( $\ell, m_\ell$ ) и спиновому ( $s, m_s$ ) состояниям, однако мы опускаем эти вопросы для простоты изложения.

В табл. 9.1 приведено сравнение всех трех типов статистики применительно к описанию системы, состоящей из двух частиц, которые могут находиться в трех различных состояниях. Легко заметить, что статистика МБ обеспечивает максимальное, а статистика ФД — минимальное число возможных состояний. В случае статистики МБ обе частицы занимают совместно одну треть общего числа состояний, в статистике БЭ число совместных размещений соответствует половине состояний, а в статистике ФД такие состояния

**Таблица 9.1.** Число возможных состояний и их заселенности в системе из двух частиц (**A**, **B**) и трех энергетических уровней (1, 2, 3) в случае статистики Максвелла—Больцмана, Бозе—Эйнштейна и Ферми—Дирака.

Статистика Максвелла—Больцмана 9 состояний			Статистика Бозе—Эйнштейна 6 состояний			Статистика Ферми—Дирака 3 состояния		
1	2	3	1	2	3	1	2	3
A	B		A	A		A	A	
B	A			A	A		A	A
		A	B	A		A		A
		B	A	AA				
A			B		AA			
B			A			AA		
AB								
	AB					AB		

вообще отсутствуют. Таким образом, по сравнению с классической статистикой МБ бозоны имеют тенденцию к более тесному размещению, а фермионы — тенденцию к отдалению.

Особенно удивительным это различие становится при переходе к абсолютному нулю температуры, когда все бозоны конденсируются на низшем энергетическом уровне, а фермионы (например, электроны) могут занимать энергетические уровни лишь попарно, начиная с низшего до так называемой энергии Ферми  $E_F$ , выше которой уровни остаются незаполненными. Уникальные явления сверхтекучести гелия ниже  $\lambda$ -точки  $T_\lambda$  и сверхпроводимость ниже точки перехода  $T_c$  демонстрируют особенности, сходные с тем, что можно ожидать для бозонных конденсатов, поскольку атомы  $^4\text{He}$  и куперовские пары, образованные связанными электронами (или дырками), представляют собой бозоны.

## 10. ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Особый интерес представляет функция распределения  $f(E)$ , описывающая заселенность энергетических уровней в зависимости от температуры для трех типов статистики. Напомним, что  $f(E)$  пропорциональна вероятности того, что отдельная частица будет находиться в состоянии с энергией  $E$ . Функции распределения для

различных типов статистики имеют вид

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad \text{статистика Ферми—Дирака,} \quad (56)$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} \quad \text{статистика Бозе—Эйнштейна,} \quad (57)$$

$$f(E_j) = \frac{N e^{-\beta E_j}}{\sum e^{-\beta E_j}} \quad \text{статистика Максвелла—Больцмана.} \quad (58)$$

Так называемый химический потенциал  $\mu$  подбирается с таким расчетом, чтобы сумма вероятностей давала полное число частиц в системе

$$\sum f(E_j) = N. \quad (59)$$

Для статистики Ферми—Дирака

$$0 \leq f(E) \leq 1, \quad (60)$$

что при абсолютном нуле температур дает

$$f(E) = \begin{cases} 1 & \text{для } E < \mu, \\ 0 & \text{для } E > \mu, \end{cases} \quad (61)$$

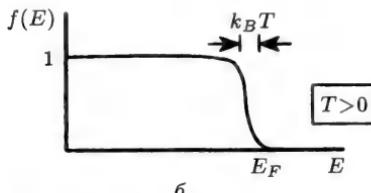
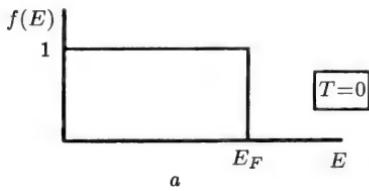


Рис. 9.3. Функция распределения Ферми—Дирака  $f(E)$  при  $T = 0$  (а) и при  $0 < T < T_F$  (б). (Из книги: C. P. Poole, Jr et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 9.)

где  $\mu = E_F$  — энергия Ферми. На рис. 9.3 приведены зависимости  $f(E)$  от  $E$  для статистики ФД при  $T = 0$  (а) и при  $T \ll T_F$  (б). Температура Ферми  $T_F$  определяется выражением

$$E_F = k_B T_F. \quad (62)$$

Многие свойства электронов проводимости в металлах могут быть удовлетворительно описаны функцией распределения (56) для статистики Ферми—Дирака при  $T \ll T_F$ , причем характерные значения температуры  $T_F$  для металлов составляют  $\sim 10^4$  К.

Вид распределения (57) для статистики Бозе—Эйнштейна демонстрирует, что функция  $f(E)$  может неограниченно возрастать при стремлении температуры к абсолютному нулю, и при 0 К может произойти слияние всех частиц системы на низшем энергетическом уровне. Это явление называется конденсацией Бозе—Эйнштейна. С другой стороны, при очень высоких температурах все три типа статистики переходят в классическую статистику МБ, т. е. можно считать, что  $f(E) \sim e^{-\beta E}$  при всех энергиях, за исключением низших.

## 11. СТАТИСТИКА ФОТОНОВ

Фотоны относятся к бозе-частицам, численность которых ничем не ограничена, поскольку они могут рождаться и поглощаться внутри системы, вследствие чего в соответствующей статистике отсутствует химический потенциал ( $\mu = 0$ ). Функция распределения фотонов определяется выражением (57) (с  $\mu = 0$ ) и обычно записывается через частоту  $\omega$  вместо энергии  $E$ ,  $\omega = E/\hbar$ . Функция распределения фотонов называется законом распределения Планка

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}. \quad (63)$$

Для нахождения плотности полной энергии  $u(T)$  энергии отдельного фотона  $\hbar \omega$  следует умножить на плотность состояний  $D(\omega)$  и проинтегрировать по всем частотам, что приводит к известному закону Стефана—Больцмана

$$u(T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (64)$$

где  $x = \beta \hbar \omega$ . На рис. 9.4 представлена зависимость подынтегральной функции в (64) от переменной  $x$ , которая характеризует частотное распределение энергии излучения абсолютно черного тела.

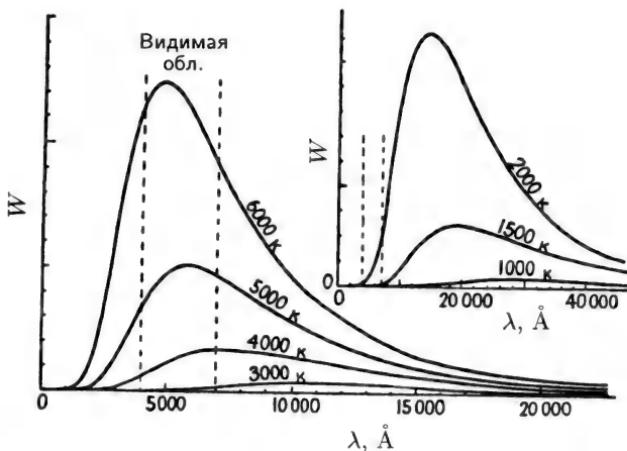


Рис. 9.4. Зависимость плотности энергии фотонов  $W$  от длины волны  $\lambda$  [подынтегральная функция в выражении (64)]. На графиках представлены распределения энергии излучения абсолютно черного тела для семи различных значений температуры. (Из книги: *H. E. White, Fundamentals of Optics*, McGraw-Hill, New York, 1950, p. 431.)

Интеграл в (64) равен  $\pi^4/15$ , а результат интегрирования обычно представляют в виде температурной зависимости излучательной мощности  $P$  абсолютно черного тела

$$P = \sigma T^4 \quad (65)$$

с постоянной Стефана–Больцмана  $\sigma$

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^2}, \quad (66)$$

численно равной

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{К}^4}. \quad (67)$$

Максимум подынтегральной функции в (64) приходится на значение  $\beta \hbar \omega \approx 3$ , вследствие чего частота в максимуме излучения пропорциональна температуре. Таким образом, для двух разных температур ( $T_1$  и  $T_2$ ) мы получаем две частоты в максимуме излучения, связанные соотношением

$$\frac{\omega_1}{T_1} = \frac{\omega_2}{T_2}, \quad (68)$$

известным под названием закона Вина. Приведенные на рис. 9.4 зависимости плотности энергии фотонов от длины волны демонстрируют сдвиг максимума излучения с ростом температуры.

## 12. СТАТИСТИКА ОРТО-ПАРА СОСТОЯНИЙ

Протон, представляющий собой ядро атома водорода, имеет спин  $I = \frac{1}{2}$ , а в молекуле водорода спины ядер складываются векторно

$$\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 = \mathbf{I}, \quad (69)$$

образуя результирующий ядерный спин  $I$ . Отдельные спины при этом могут ориентироваться антипараллельно (образуя синглетное состояние,  $I = 0$ ) или параллельно (образуя триплетное состояние,  $I = 1$ ) относительно друг друга. Волновые функции  $\psi$  этих состояний строятся на основе базисной функции  $|m_1 m_2\rangle$  и являются антисимметричными для синглетного состояния

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |--\rangle] \quad m = 0 \quad (70)$$

и симметричными для триплетного состояния

$$\psi = |--\rangle \quad m = -1, \quad (71a)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |--\rangle] \quad m = 0, \quad (71b)$$

$$\psi = |++\rangle \quad m = +1. \quad (71c)$$

Молекулы в синглетном состоянии называются параводородом, а в триплетном — ортовородородом. Вращательная энергия молекулы характеризуется квантовым числом  $K$ , а четность вращательной волновой функции есть  $(-1)^K$ . Полная волновая функция должна быть антисимметричной (так как ядра являются фермионами), и, следовательно, вращательные состояния параводорода должны иметь четные значения  $K$ , а ортовородора — нечетные значения  $K$ . Вращательные переходы не сопровождаются изменением ядерного спина. Это приводит к правилу отбора  $\Delta m = 0$  и правилу отбора для вращательных переходов,  $\Delta K = \pm 2$ . Все четыре спиновых состояния (70) — (71) равновероятны, следовательно, число молекул ортовородора в три раза превосходит число молекул параводорода. В результате во вращательном спектре водорода наблюдается чередование линий с относительными интенсивностями  $1 : 3 : 1 : 3 : \dots$ , подтверждая влияние ядерной статистики на заселенность состояний.

## ГЛАВА 10

---

# ПОСТОЯННЫЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ

---

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе рассматриваются вопросы электростатики и магнитостатики, или, другими словами, не зависящие от времени стационарные электрические и магнитные явления. Основное внимание уделено общим принципам, тогда как более конкретные вопросы, а именно электрические и магнитные мультиполи будут обсуждаться в следующей главе. Всюду далее используются единицы СИ.

Изложение начинается с рассмотрения некоторых представлений о природе электрических и магнитных полей. Затем зависимость от времени вводится в связи с уравнениями Максвелла, после чего мы вновь возвращаемся к обсуждению вопросов электростатики и магнитостатики.

## 2. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ

Рассмотрим область свободного пространства, в которой одновременно присутствует и электрическое поле  $\mathbf{E}$ , и магнитное поле  $\mathbf{B}$ . На одиночный заряд  $q$ , движущийся в этой области со скоростью  $\mathbf{v}$ , действует сила Лоренца

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (1)$$

Напряженность электрического поля  $\mathbf{E}$  можно определить как силу, действующую на единичный заряд, а магнитную индукцию  $\mathbf{B}$  — как силу, действующую на единичный элемент тока. Эти два поля могут быть измерены на опыте и служат основными понятиями теории электромагнетизма. С полями  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  связаны поля, обозначаемые  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{H}$  и называемые электрическим смещением и напряженностью магнитного поля, соответственно. Вакуум, как известно,

характеризуется электрической постоянной  $\epsilon_0$  и магнитной постоянной  $\mu_0$ , так что в пустом пространстве поля  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{H}$  определяются соотношениями

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (2)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0. \quad (3)$$

Материальная среда характеризуется абсолютной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon > \epsilon_0$  и абсолютной магнитной проницаемостью  $\mu > \mu_0$ , так что для электрического и магнитного полей в среде справедливы соотношения

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (4)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}. \quad (5)$$

В более общем случае среда может быть анизотропной, и компоненты векторов  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}$  определяются выражениями

$$\mathbf{D}_i = \sum \epsilon_{ij} \mathbf{E}_j, \quad (6)$$

$$\mathbf{B}_i = \sum \mu_{ij} \mathbf{H}_j, \quad (7)$$

где суммирование производится по пространственным координатам  $j = x, y, z$ . Сказанное означает, что в анизотропной среде направления векторов  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{E}$  могут не совпадать; то же относится и к векторам  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{H}$ . Далее будут рассматриваться только изотропные среды.

Если среда обладает диэлектрической поляризацией  $\mathbf{P}$ , определяемой как электрический дипольный момент единицы объема, и кроме того намагниченностью  $\mathbf{M}$ , определяемой как магнитный дипольный момент единицы объема, то поля будут связаны соотношениями

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 \mathbf{E}(1 + \chi_e), \quad (8)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 \mathbf{H}(1 + \chi), \quad (9)$$

где  $\chi_e = P/\epsilon_0 E$  и  $\chi = M/H$  – безразмерные диэлектрическая и магнитная восприимчивости, соответственно.

### 3. УРАВНЕНИЯ МАКСВЕЛЛА

Электрические и магнитные поля, рассмотренные в предыдущем разделе, связаны между собой уравнениями Максвелла. Первая па-

ра уравнений Максвелла, содержит явную зависимость от времени и выражает вихревой характер полей

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J}, \quad (10)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (11)$$

где  $\mathbf{J}$  — плотность тока; поскольку пока нас будут интересовать только статические поля, из этих уравнений можно исключить зависимость от времени

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}, \quad (12)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0. \quad (13)$$

Вторая пара уравнений Максвелла даже в общем случае не содержит зависимостей от времени и характеризует источники

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (15)$$

где  $\rho$  обозначает плотность электрических зарядов. Уравнения (12) и (15) для статических полей можно записать в виде уравнений для полей  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{E}$ , используя соотношения (4 и 5)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{J}, \quad (16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon; \quad (17)$$

при выводе этих соотношений среда считалась однородной и изотропной, т. е. магнитная проницаемость  $\mu$  и диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  не зависели от координат. Плотность энергии электрического и магнитного полей дается выражениями

$$U_E = \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}, \quad U_M = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{H} \quad (18)$$

соответственно.

С формальной точки зрения  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  являются векторными полями, поскольку их величины и направления изменяются в пространстве от точки к точке. Тем не менее далее мы будем говорить о них просто как о векторах.

#### 4. ПОТЕНЦИАЛЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Электрические и магнитные поля удобно выражать через их потенциалы. Как видно из уравнения Максвелла (14), магнитное поле  $\mathbf{B}$

не имеет поточников,  $\nabla \mathbf{B} = 0$ ; это означает, что  $\mathbf{B}$  является соленоидальным полем и, таким образом, может быть выражено через ротор векторного потенциала  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (19)$$

С другой стороны, из уравнения (13) следует, что статическое электрическое поле является безвихревым,  $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ , и, следовательно, может быть введено через скалярный потенциал  $\phi$ :

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi. \quad (20)$$

Для нестационарных полей вместо уравнения (13) придется использовать уравнение (11), и временная зависимость электрического поля  $\mathbf{E}$  будет определяться в том числе и через векторный потенциал

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (21)$$

Плотность заряда  $\phi$  и плотность тока  $\mathbf{J}$  могут рассматриваться как источники электрического и магнитного полей, поскольку они порождают соответствующие поля.

## 5. ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ И МАГНИТНАЯ ПОСТОЯННЫЕ

Электрическая постоянная  $\epsilon_0$  и магнитная постоянная  $\mu_0$  характеризуют величину скорости света в вакууме:

$$(\mu_0\epsilon_0)^{-1/2} = c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ м/с} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}. \quad (22)$$

Монохроматический свет представляет собой электромагнитную волну, в которой векторы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  электрического и магнитного полей взаимно ортогональны и осциллируют с частотой  $\omega$  в плоскости, перпендикулярной направлению распространения волны. Плотность потока энергии определяется вектором Пойнтинга  $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ . Плотность и энергии  $\frac{1}{2}\mu H^2$  и  $\frac{1}{2}\epsilon E^2$ , запасенной в электрическом и магнитном полях (18), равны между собой

$$\frac{1}{2}\mu H^2 = \frac{1}{2}\epsilon E^2, \quad (23)$$

откуда для импеданса следует

$$E/H = (\mu/\epsilon)^{1/2}. \quad (24)$$

Импеданс вакуума составляет

$$(\mu_0/\epsilon_0)^{1/2} = 120\pi \text{ Ом}. \quad (25)$$

Решая уравнения (22) и (25) относительно  $\epsilon_0$  и  $\mu_0$ , находим

$$\epsilon_0 = \frac{1}{120\pi c} = \frac{1}{36\pi} 10^{-9} \text{ Ф/м}, \quad (26)$$

$$\mu_0 = \frac{120\pi}{c} = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гн/м}. \quad (27)$$

Часто удобно использовать безразмерные относительную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon/\epsilon_0$  и относительную магнитную проницаемость  $\mu/\mu_0$ . В оптике используется следующее выражение для показателя преломления среды:

$$n = (\epsilon/\epsilon_0)^{1/2}. \quad (28)$$

В оптике, как правило, считается, что  $\mu = \mu_0$ , и показатель преломления равен отношению скорости света в вакууме  $c$  к скорости света в среде  $v$ :

$$n = c/v. \quad (29)$$

## 6. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА СРЕД

В отсутствие поверхностных электрических зарядов и токов нормальные компоненты векторов  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}$  и тангенциальные составляющие векторов  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  не должны испытывать разрывов при переходе через границу раздела сред, как показано на рис. 10.1. Наличие поверхностных зарядов с плотностью  $\sigma$  или поверхностных токов с плотностью  $K$  приводит к возникновению разрывов нормальной со-

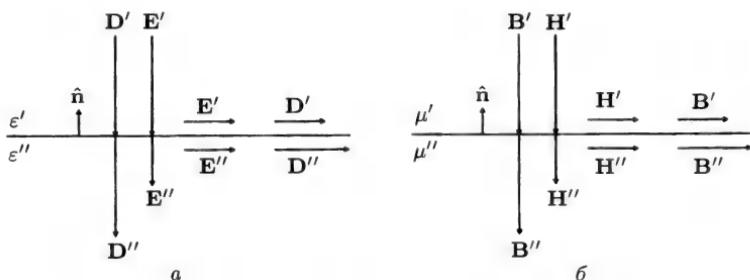


Рис. 10.1. Граничные условия для электрических полей  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{D}$  (a) и магнитных полей  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{H}$  (b) на границе раздела двух сред с соответствующими диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon'' = 2\epsilon'$  и магнитными проницаемостями  $\mu'' = 2\mu'$  при отсутствии поверхностных токов и зарядов.

ставляющей  $D_{\perp}$  и тангенциальной составляющей  $H_{\parallel}$ , соответственно. Граничные условия на поверхности раздела сред 1 и 2 имеют вид

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0, \quad (30a)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0, \quad (30b)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \sigma, \quad (30c)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{K}. \quad (30d)$$

Отметим, что поверхностные токи  $\mathbf{K}$  текут параллельно границе раздела и перпендикулярно вектору  $\mathbf{H}$  на поверхности. Плотность поверхностного заряда измеряется в кулонах на кв. метр ( $\text{Кл}/\text{м}^2$ ), а плотность поверхностного тока  $\mathbf{K}$  — в амперах на метр ( $\text{А}/\text{м}$ ).

## 7. ИСТОЧНИКИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Перейдем к изучению членов  $\rho$  и  $\mathbf{J}$ , описывающих соответственно источники полей  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  в уравнениях (16) и (17). Рассмотрим сначала электрическое поле. Проинтегрировав уравнение (17) по объему, полностью включающему в себя область где расположены заряды  $\rho$ , получим

$$\int \nabla \cdot \mathbf{E} dv = \frac{1}{\epsilon} \int \rho dv. \quad (31)$$

Преобразуя интеграл в левой части к поверхностному и замечая, что второй интеграл дает просто полный заряд  $Q$ , приходим к результату

$$\int \mathbf{E} \cdot d\sigma = Q/\epsilon, \quad (32)$$

известному как закон Гаусса.

Пусть заряд  $q$  — точечный, а поверхность — сфера радиусом  $r$ ; учитывая, что в силу симметрии величина  $E$  на поверхности сферы всюду одинакова, с помощью закона Гаусса (32) получим

$$\mathbf{E} = \frac{q\hat{\mathbf{n}}}{4\pi\epsilon r^2} \quad (\text{вне сферы}). \quad (33)$$

Если заряд  $q$  положителен, то вектор  $\mathbf{E}$  направлен от заряда, где  $\hat{\mathbf{n}}$  — радиально направленный единичный вектор. Полный поток электрического поля, который можно найти интегрированием уравнения (32) по любой поверхности, заключающей внутри себя все заряды, всегда равен  $q/\epsilon$ .

Плотность заряда, равномерно распределенного по объему сферы радиусом  $R$ , есть

$$\rho = \frac{3q}{4\pi R^3}. \quad (34)$$

Поле внутри равномерно заряженной сферы на расстоянии  $r$  от ее центра

$$\mathbf{E} = \frac{qr\hat{\mathbf{n}}}{4\pi\epsilon R^3} \quad (\text{внутри сферы}) \quad (35)$$

в силу того, что полный заряд в выделенном объеме равен  $4\pi r^3 \rho/3$ , а влияние зарядов, находящихся на большем удалении от центра, взаимно компенсируется. Таким образом, поле  $\mathbf{E}$  сначала растет внутри сферы пропорционально расстоянию  $r$  от центра, а затем спадает как  $1/r^2$  за ее пределами.

Силовые линии электрического поля начинаются на положительных зарядах и кончаются на отрицательных. Если в некоторой области пространства заключено одинаковое число положительных и отрицательных зарядов, то все силовые линии будут начинаться и заканчиваться в этой области, хотя некоторые из них могут удаляться на значительные расстояния.

## 8. ИСТОЧНИКИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Обсудим теперь роль электрического тока как источника магнитного поля. Пусть ток пронизывает некоторую поверхность. Величину тока можно определить, проинтегрировав скалярное произведение  $\mathbf{J} \cdot d\sigma$  по рассматриваемой поверхности ( $d\sigma$  — элемент этой поверхности). Используя уравнение Максвелла (16), получим

$$\int (\nabla \times \mathbf{B}) \cdot d\sigma = \mu \int \mathbf{J} \cdot d\sigma. \quad (36)$$

Правая часть этого уравнения представляет собой полный ток  $I$ , тогда как левая может быть преобразована к интегралу по замкнутому контуру (на который опирается поверхность); в результате для пустого пространства имеем

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\ell = \mu_0 I. \quad (37)$$

Если ток течет вдоль прямой, то силовые линии магнитного поля  $\mathbf{B}$  представляют собой окружности с центром на линии тока и расположенные в плоскости, перпендикулярной этой линии, как показано на рис. 10.2; в этом случае интеграл (37) дает

$$B = \mu_0 I / 2\pi r \quad (\text{вне проводника}), \quad (38)$$

где  $r$  — радиус окружности.

Если отставленный большой палец правой руки направить по току, то в соответствии с первым правилом правой руки сжатые в

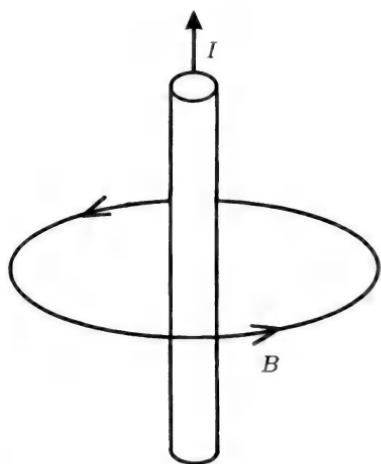


Рис. 10.2. Силовая линия магнитного поля прямолинейного проводника с током  $I$ .

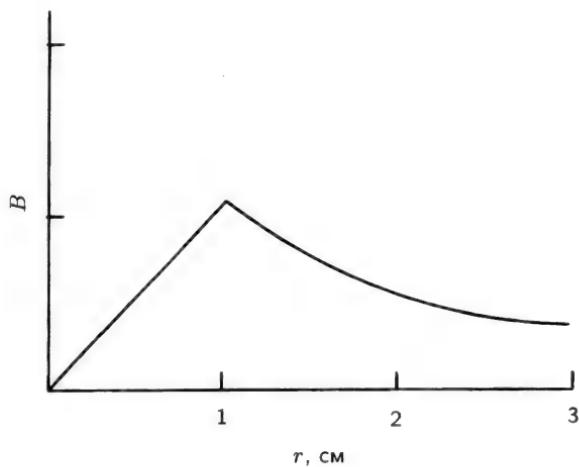


Рис. 10.3. Магнитное поле  $B$  внутри и снаружи проводника с током; радиус проводника  $R = 1$  см. График построен в предположении, что плотность тока постоянна в сечении проводника.  $J = I/\pi R^2$ .

кулак остальные четыре пальца будут указывать направление силовых линий магнитного поля  $B$ .

Если плотность тока постоянна в сечении проводника радиусом  $R$

$$J = I/\pi R^2, \quad (39)$$

то из выражений (34) — (35) следует, что внутри проводника

$$B = \frac{\mu_0 r I}{2\pi R^2} \quad (\text{внутри проводника}). \quad (40)$$

Таким образом, поле  $B$  внутри проводника линейно возрастает с увеличением расстояния  $r$  от центра проводника, а вне проводника спадает как  $1/r$ , что видно из рис. 10.3.

## 9. ПОСТОЯННОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

Мы познакомились с тем, что заряды и электрические токи играют роль источников электрических и, соответственно, магнитных полей; обратимся теперь к более подробному рассмотрению задач электростатики. Сила, действующая на электрический заряд  $q$ , помещенный в электрическое поле  $\mathbf{E}$ , определяется формулой (1)

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E}. \quad (41)$$

Подставляя сюда равенство (35), приходим к закону Кулона, определяющему силу взаимодействия двух зарядов  $q$  и  $q'$ :

$$F = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (42)$$

причем для одноименных зарядов это сила отталкивания, а для разноименных — притяжение. Плотность заряда  $\rho$  создает в пустом пространстве в точке  $r$  поле, величина которого дается интегралом

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r', \quad (43)$$

который можно также представить в виде

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \nabla_r \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r', \quad (44)$$

где оператор градиента  $\nabla_r$  действует только на пространственные переменные  $\mathbf{r}$ ; приняв во внимание равенство (20),

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad (45)$$

нетрудно показать, что скалярный потенциал  $\phi(\mathbf{r})$  дается выражением

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'. \quad (46)$$

Работа  $W$ , связанная с перемещением заряда  $q$  из точки  $A$  в точку  $B$ , равна

$$W = - \int_A^B \mathbf{F} \cdot d\ell = -q \int_A^B \mathbf{E} \cdot d\ell = q(\phi_A - \phi_B) \quad (47)$$

и, таким образом, не зависит от пути от  $A$  до  $B$ .

Объединение уравнений  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$  и  $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon$  приводит к уравнению Пуассона

$$\nabla^2\phi = -\rho/\epsilon, \quad (48)$$

для которого мы уже нашли общее решение (46). В отсутствие зарядов это уравнение превращается в однородное уравнение Лапласа

$$\nabla^2\phi = 0. \quad (49)$$

Многие задачи электростатики сводятся к решению этих уравнений при заданных граничных условиях.

## 10. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

С помощью уравнения Лапласа обычно решаются задачи о распределении электрического поля внутри замкнутой области при заданных значениях поля на поверхности, ограничивающей данную область, или при заданных значениях потенциала на этой поверхности. Если граничная поверхность является хорошим проводником, то из (30б) и (30в) следует, что тангенциальная составляющая электрического поля на поверхности отсутствует, а нормальная составляющая равна

$$E_\perp = \sigma/\epsilon = \partial\phi/\partial n, \quad (50)$$

где  $\sigma$  — поверхностная плотность заряда, а  $\partial\phi/\partial n$  — нормальная производная потенциала на поверхности [см. (45)]. Задание на поверхности  $E_\perp$ , или  $\partial\phi/\partial n$ , отвечает краевой задаче Неймана. Если заряды неподвижно закреплены на поверхности, то потенциал принимает значения, согласующиеся с характером распределения зарядов.

В краевой задаче Дирихле, напротив, вместо плотности зарядов задается распределение потенциала на поверхности. Задание такого распределения на проводящей поверхности приводит к перераспределению зарядов в соответствии с видом потенциала. Краевая задача Коши при одновременном задании потенциала  $\phi$  и его нормальной производной  $\partial\phi/\partial n$  может, вообще говоря, не иметь решения. Тем не менее возможно использование смешанных краевых усло-

вий, если  $\phi$  задать на некотором участке поверхности, а  $\partial\phi/\partial n$  — на оставшейся ее части.

## 11. РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

Решение краевой задачи Неймана ( $G_N$ ) и краевой задачи Дирихле ( $G_D$ ) для уравнения Пуассона (48), полученные методом функций Грина, имеют вид

$$\phi(r) = \int_v \rho(\mathbf{r}) G_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \phi}{\partial n} G_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') da', \quad (51)$$

$$\phi(r) = \int_v \rho(\mathbf{r}) G_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3 r' - \frac{1}{4\pi} \int \phi(\mathbf{r}') \frac{\partial G_D}{\partial n'} da'. \quad (52)$$

Этому методу посвящен разд. 10 гл. 28.

Другой подход к решению задач состоит в использовании метода изображений. Этот метод состоит в том, что для удовлетворения граничных условий вне рассматриваемой области пространства размещаются один или несколько зарядов, подобранных по величине и знаку; такие заряды называют мнимыми. Наличие симметрии может упростить выбор конфигурации мнимых зарядов.

Третий подход к решению краевых задач состоит в использовании метода Фурье, позволяющего определить коэффициенты разложения исходя из граничных условий. Подробности этого метода обсуждаются в разд. 9 гл. 27.

Один из наиболее общих подходов к решению краевых задач состоит в использовании известных решений дифференциальных уравнений, получаемых, например, методом разделения переменных в уравнении Лапласа, о чем говорится в разд. 4 гл. 28. В декартовой системе координат наряду с периодическими решениями вида  $\sin kx$  и  $\cos kx$  могут существовать растущие и убывающие решения  $\operatorname{sh} kx$  и  $\operatorname{ch} kx$ . В экспоненциальной форме эти решения записываются в виде  $e^{\pm ikx}$  и  $e^{\pm \kappa x}$ , соответственно. В цилиндрической системе координат решения, как правило, имеют гармоническую зависимость от угловой переменной  $\varphi$  вида  $\sin m\varphi$  и  $\cos m\varphi$ ; по осевой переменной  $z$  решением может быть экспоненциально растущим (или убывающим) вида  $\operatorname{sh} kz$  или периодическим ( $\sin kz$ ), а по радиальной переменной  $\rho$  оно дается функциями Бесселя  $J_n(k\rho)$  или Неймана  $N_n(k\rho)$ . В сферической системе координат угловая зависимость решений определяется тессеральными гармониками  $Z_{LM}^{CS}(\theta, \varphi)$ , представляющими собой линейные комбинации пары сферических гармоник с теми же  $L$  и  $M$ . Поскольку тессе-

ральные гармоники являются вещественными функциями, их использование предпочтительно по сравнению с комплексными сферическими функциями. Согласно разд. 4 гл. 28, решение уравнения Лапласа хотя бы по одной переменной должно быть гармоническим и хотя бы по одной переменной растущим или убывающим.

## 12. ТЕССЕРАЛЬНЫЕ И СФЕРИЧЕСКИЕ ГАРМОНИКИ

Тессеральные гармоники  $Z_{LM}^{SC}(\theta, \varphi)$  представляют собой вещественную часть сферических гармоник

$$Y_{LM}(\theta, \varphi) = (-1)^M \left\{ \frac{2L+1}{4\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right\}^{1/2} \times \\ \times P_L^M(\cos \theta) e^{iM\varphi} \quad (53)$$

и выражаются в виде линейных комбинаций  $[Y_{LM}(\theta, \varphi) \pm Y_{L-M}(\theta, \varphi)]/\sqrt{2}$ , о чем говорится в разд. 7 гл. 28. Поскольку потенциал в задачах электростатики должен быть вещественным, тессеральные гармоники дают нужные решения в цилиндрической системе координат. Они определяются выражениями

$$Z_{LO}(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{2L+1}{4\pi} \right\}^{1/2} P_L(\cos \theta), \quad (54a)$$

$$Z_{LM}^C(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{2L+1}{2\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right\}^{1/2} P_L^M(\cos \theta) \cos M\varphi, \quad (54b)$$

$$Z_{LM}^S(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{2L+1}{2\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right\}^{1/2} P_L^M(\cos \theta) \sin M\varphi, \quad (54b)$$

в которых  $M$  должно быть положительным, и  $Z_{LO} = Y_{LO}$  при  $M = 0$ . Если использовать соображения симметрии при решении практических задач, как правило, удается исключить либо функции (54b), либо (54b). Если же для решения электростатических задач используются сферические гармоники, как это рекомендуеться в некоторых руководствах, то для получения вещественного результата они должны быть сгруппированы таким образом, чтобы получились тессеральные гармоники. Тессеральные и сферические гармоники обладают общими со сферическими гармониками свой-

ствами ортогональности, полноты, а также подчиняются правилам суммирования. Например,

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 4\pi \sum \sum \sum \frac{1}{2L+1} \frac{r_{\leq}^L}{r_{>}^{L+1}} Z_{LM}^j(\theta', \varphi) Z_{LM}^j(\theta, \varphi). \quad (55)$$

Тессеральные гармоники низших порядков без учета нормировочных коэффициентов могут легко быть получены из соответствующих сферических функций с помощью таблицы разд. 7 гл. 28:

$$Z_{00} = 1 \quad (\text{с учетом нормировки } Z_{00} = 1/2\sqrt{\pi}), \quad (56)$$

$$Z_{10} = z/r = \cos \theta,$$

$$Z_{11}^C = x/r = \sin \theta \cos \varphi, \quad (57)$$

$$Z_{11}^S = y/r = \sin \theta \sin \varphi,$$

$$Z_{20} = (3z^2 - r^2)/r^2 = 3 \cos \theta - 1,$$

$$Z_{21}^C = (zx/r^2)/r^2 = \cos \theta \sin \theta \cos \varphi,$$

$$Z_{21}^S = (yz/r^2)/r^2 = \cos \theta \sin \theta \sin \varphi, \quad (58)$$

$$Z_{22}^C = (x^2 - y^2)/r^2 = \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi),$$

$$Z_{22}^S = xy/r^2 = \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi.$$

Для удобства здесь использованы обе формы записи в декартовых и сферических координатах. Нормированные тессеральные гармоники для  $L = 0, 1, 2, 3$  приведены в гл. 28, табл. 7.

### 13. ПОСТОЯННОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

После изложения основ электростатики уместно рассмотреть постоянное магнитное поле. Уравнения Максвелла (14) и (16) дают

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{J}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0. \end{aligned} \quad (59)$$

Поскольку ротор имеет нулевую дивергенцию, то

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0; \quad (60)$$

это соотношение можно также вывести из уравнения непрерывности

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (61)$$

в котором производная  $\partial \rho / \partial t$  обращается в нуль в статическом случае.

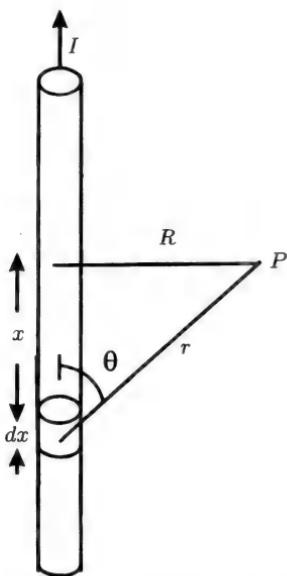


Рис. 10.4. Система координат, использованная при вычислении магнитного поля в точке  $P$  на расстоянии  $R$  от проводника с током  $I$ . Интегрирование по углу  $\theta$  выполняется в пределах от  $\theta = 0$  до  $\theta = \pi$ .

Как следует из соотношения (38), прямолинейный проводник с током  $I$  создает магнитное поле  $\mu_0 I / 2\pi r$ . Обобщением этого соотношения является закон Бю–Савара, согласно которому элемент проводника длиной  $dx$  с током  $I$  создает магнитное поле  $d\mathbf{B}$

$$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I dx \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (62)$$

Для нахождения магнитного поля  $\mathbf{B}$ , вычислим интеграл

$$\int \frac{d\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{r^3} \Rightarrow \int \frac{\sin \theta dx}{r^2} \Rightarrow \frac{1}{R} \int \sin \theta d\theta \Rightarrow \frac{2}{R}, \quad (63)$$

где, согласно рис. 10.4,  $x = R \operatorname{ctg} \theta$ ,  $dx = R d\theta / \sin^2 \theta$ ; в результате приходим к выражению

$$B = \frac{\mu_0 I}{2\pi R}, \quad (64)$$

совпадающему с полученным ранее результатом (38).

Если элемент  $d\mathbf{x}$  содержит заряд  $q$ , движущийся со скоростью  $v$ , то произведение  $Id\mathbf{x}$  в (62) можно приравнять  $q\mathbf{v}$ , так что для магнитного поля  $\mathbf{B}$ , создаваемого движущимся зарядом, получится

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (65)$$

Если заменить  $Id\mathbf{x}$  на  $\mathbf{J}d^3r'$  и проинтегрировать по объему, получится выражение для магнитного поля  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ , создаваемого в точке  $\mathbf{r}$  током  $\mathbf{J}(\mathbf{r}')$ :

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3r'; \quad (66)$$

это выражение аналогично выражению (43) для электрического поля  $\mathbf{E}$ , создаваемого объемным распределением зарядов. По аналогии с формулой (44) последнее выражение можно записать в виде

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \nabla_r \times \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r', \quad (67)$$

где оператор  $\nabla_r \times$  действует на компоненты  $x, y, z$  вектора  $\mathbf{r}$ . Поскольку поле  $\mathbf{B}$  может быть представлено как ротор векторного потенциала  $\mathbf{A}$ , последнему можно сопоставить интеграл в (67):

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'; \quad (68)$$

этот результат является аналогом соотношения (46) для скалярного потенциала  $\phi(\mathbf{r})$ .

В заключение приведем выражения для силы  $\mathbf{F}$  и момента силы  $\mathbf{N}$ , действующих на элемент среды с объемной плотностью тока  $\mathbf{J}$  со стороны магнитного поля  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{J}(\mathbf{r}') \times \mathbf{B}(\mathbf{r}') d^3r', \quad (69)$$

$$\mathbf{N}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{r}' \times (\mathbf{J} \times \mathbf{B}) d^3r'. \quad (70)$$

## 14. ЗАКОН ФАРАДЕЯ

До сих пор рассматривались случаи, в которых отсутствовала явная зависимость физических величин от времени. В заключение этой главы скажем несколько слов о законе индукции Фарадея, в котором речь идет об изменении магнитного потока со временем.

Рассмотрим поверхность  $S$ , опирающуюся на замкнутый проводящий контур; обозначим через  $\mathbf{n}$  единичный вектор нормали к этой поверхности. Если контур помещен в магнитное поле  $\mathbf{B}$ , то магнитный поток  $\phi$  через этот контур определяется как поверхностный интеграл

$$\phi = \int_S \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA. \quad (71)$$

Закон Фарадея гласит, что изменение магнитного потока индуцирует в контуре электродвижущую силу (эдс)

$$\text{эдс} = - \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (72)$$

Знак минус в этом выражении обусловлен законом Ленца, согласно которому индуцированный (обусловленный наведенной эдс) в контуре ток будет протекать в направлении, препятствующем изменению магнитного потока. Эдс в проводнике определяется как контурный интеграл от электрического поля  $\mathbf{E}$ .

$$\text{эдс} = \oint \mathbf{E} \cdot d\ell. \quad (73)$$

Электрический генератор представляет собой устройство, превращающее механическую энергию в электрическую. Механическая энергия используется для перемещения проводящего контура в магнитном поле, а наведенная в контуре эдс создает ток, который совершает полезную работу.

## ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ПОЛЯ В СПЛОШНЫХ СРЕДАХ И МУЛЬТИПОЛИ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Предметом обсуждения данной главы являются электрические и магнитные мультиполи, т. е. монополи, диполи, квадруполи и т. д., а также сплошные среды, имеющие поляризацию или намагниченность, которые обусловлены объемным распределением микроскопических электрических или магнитных диполей, соответственно. Начнем с обсуждения электрических мультиполей, затем рассмотрим магнитные мультиполи, поля в сплошных средах и, наконец, тела, имеющие форму эллипса. В заключение затрагивается проблема мультиполей в квантовой механике, физике атома и ядра.

### 2. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МУЛЬТИПОЛИ

В гл. 10 было показано, что скалярный электрический потенциал определяется соотношением (46)

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d^3 r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \quad (1)$$

разложение множителя  $(r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}')^{-1/2}$  по сферическим и тессеральным гармоникам приводит к равенствам

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum \frac{4\pi}{2\ell + 1} \left\{ \int Y_{\ell m}^*(\theta' \varphi') r'^\ell \rho(\mathbf{r}') d^3 r' \right\} \frac{Y_{\ell m}(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} = \quad (2)$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum \frac{4\pi}{2\ell + 1} \left\{ \int Z_{\ell m}^j(\theta' \varphi') r'^\ell \rho(\mathbf{r}') d^3 r' \right\} \frac{Z_{\ell m}^j(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}}. \quad (3)$$

Свойства этих гармоник рассмотрены в гл. 10 и 28. Коэффициенты разложения  $M_{\lambda m}^j$  в фигурных скобках — мультипольные моменты —

$$M_{\ell m}^j = \int Z_{\ell m}^j(\theta', \varphi') r'^\ell \rho(\mathbf{r}') d^3 r'; \quad (4)$$

они характеризуют распределения зарядов и называются по-разному в зависимости от числа  $\ell$

$$\begin{aligned} \ell = 0 & \text{ монополь,} \\ \ell = 1 & \text{ диполь,} \\ \ell = 2 & \text{ квадруполь,} \\ \ell = 3 & \text{ октуполь,} \\ \ell = 4 & \text{ гексадекаполь.} \end{aligned} \quad (5)$$

Приведем выражения монопольного, дипольного и квадрупольного моментов при  $m = 0$ :

$$M_{00} = \int \rho(\mathbf{r}') d^3 r' = q \quad \text{монополь,} \quad (6)$$

$$M_{10} = \int z' \rho(\mathbf{r}') d^3 r' = p_z \quad \text{диполь,} \quad (7)$$

$$M_{20} = \int (3z'^2/2) \rho(\mathbf{r}') d^3 r' = Q_{zz} \quad \text{квадруполь;} \quad (8)$$

здесь опущены нормировочные множители тессеральных гармоник. В общем случае компоненты квадрупольного момента имеют вид

$$Q_{ij} = \int (3r'_i r'_j - r'^2 \delta_{ij}) \rho(\mathbf{r}') d^3 r', \quad (9)$$

а выражения (6) и (9) являются коэффициентами мультипольного разложения потенциала

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \frac{1}{2} \sum Q_{ij} \frac{r_i r_j}{r^5} + \dots \right\}, \quad (10)$$

которое часто используется в приложениях.

Дипольный момент представляет собой вектор с компонентами  $p_x, p_y, p_z$ ; он также может быть задан величиной  $p$  и двумя полярными углами  $\theta, \varphi$ , определяющими его направление. Квадрупольный момент представляет собой симметричный тензор второго ранга с нулевым следом:

$$Q_{ij} = Q_{ji}, \quad (11a)$$

$$Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0; \quad (11b)$$

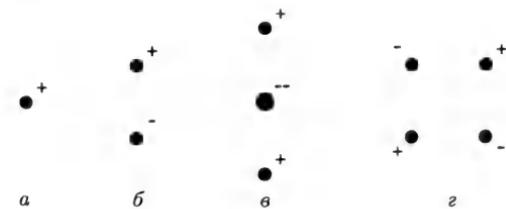


Рис. 11.1. Примеры, иллюстрирующие образование электрического монополя (а), диполя (б), а также продольного ( $\eta = 0$ ) (в) и поперечного ( $\eta = 1$ ) (г) квадрупольей.

у этого тензора пять независимых компонент. Используя углы Эйлера, его удобно привести к главным осям, т. е. к диагональному виду  $Q_{ij} = 0$  для  $i \neq j$ ; в этом случае у него будет только две независимые компоненты. Если условиться, что

$$|Q_{xx}| \leq |Q_{yy}| \leq |Q_{zz}|, \quad (12)$$

то элемент  $Q_{zz}$  будет называться квадрупольным моментом; если тензор не является аксиально-симметричным (т. е.  $Q_{xx} \neq Q_{yy}$ ), вводится параметр  $\eta$

$$\eta = -\frac{Q_{yy} - Q_{xx}}{Q_{zz}}, \quad (13)$$

$$0 \leq \eta \leq 1, \quad (14)$$

характеризующий отклонение квадрупольного момента от аксиальной асимметрии. Таким образом, величины  $Q_{zz}$  и  $\eta$  однозначно характеризуют квадрупольный момент. Поперечные компоненты тензора даются выражениями

$$Q_{xx} = -Q_{zz} \frac{1 - \eta}{2}, \quad Q_{yy} = -Q_{zz} \frac{1 + \eta}{2}. \quad (15)$$

Если  $\eta = 0$ , квадруполь обладает аксиальной симметрией ( $Q_{xx} = Q_{yy}$ );  $\eta = 1$  отвечает значительно менее вероятному случаю  $Q_{xx} = 0$  и  $Q_{yy} = -Q_{zz}$ .

К проблеме можно подойти иначе и рассмотреть последовательность мультипольных моментов, начиная с монополя (точечного заряда). При таком подходе диполь образуется парой точечных зарядов (монополей)  $q$ , одинаковых по величине, противоположных по знаку и расположенных на небольшом расстоянии  $d$  друг от друга;

монопольный момент такой пары равен нулю, а дипольный определяется равенством

$$p = qd. \quad (16)$$

Подобным образом квадруполь возникает при сближении двух противоположно направленных диполей; на рис. 11.1 показаны две возможные ситуации, при которых возникает либо продольный, либо поперечный квадруполь. В обоих случаях это чистый квадруполь, т. е. не имеющий ни монопольного, ни дипольного моментов. Совершенно аналогично октуполь,  $\ell = 3$ , может быть получен сближением двух противоположно направленных квадруполей, причем мультипольные моменты низших порядков с  $\ell = 0, 1, 2$  при такой конфигурации зарядов будут отсутствовать.

Произвольная конфигурация зарядов может иметь мультипольные моменты многих порядков. Величина  $M_{\ell m}^j$  для момента низшего порядка не зависит от положения начала координатной системы в области расположения зарядов, однако такая зависимость может иметь место для моментов более высокого порядка.

### 3. ПОЛЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЯ

Электрическое поле  $\mathbf{E}$  системы зарядов может быть вычислено как градиент потенциала  $\phi(\mathbf{r})$ :

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi; \quad (17)$$

отсюда для одиночного заряда следует закон Кулона

$$\mathbf{E} = \frac{q\mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^2}; \quad (18)$$

силовые линии этого поля расходятся радиально от заряда.

Компоненты электрического поля, создаваемого диполем, ориентированным вдоль оси  $z$ , имеют в сферической системе координат следующий вид:

$$E_r = \frac{2p \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^3}, \quad (19a)$$

$$E_\theta = \frac{p \sin \theta}{4\pi\epsilon_0 r^3}, \quad (19b)$$

$$E_\varphi = 0. \quad (19c)$$

#### 4. ЭНЕРГИЯ И МОМЕНТ СИЛЫ

Энергия  $U$  системы зарядов дается интегралом

$$U = \int \rho(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') d^3 r'; \quad (20)$$

с помощью соотношений (10) и (18) это выражение можно преобразовать к виду

$$U = q\phi(\mathbf{r}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{6} \sum Q_{ij} \frac{\partial E_j(0)}{\partial r_i} + \dots \quad (21)$$

Энергия взаимодействия  $U_{dd}$  двух диполей  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$ , расположенных на расстоянии  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  друг от друга, определяется энергией взаимодействия каждого из диполей с полем другого диполя, т. е.  $U_{dd} = -\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{E}_2 = -\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{E}_1$ , где

$$U_{dd} = \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 - 3(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_1)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_2)}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \quad (22)$$

и  $\hat{\mathbf{n}}$  обозначает единичный вектор в направлении  $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ .

На заряд  $q$ , помещенный в электрическое поле  $\mathbf{E}$ , действует сила  $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$ , придающая ему ускорение в направлении поля. На диполь  $\mathbf{p}$ , помещенный в однородное электрическое поле  $\mathbf{E}$ , действует момент силы  $\mathbf{N}$

$$\mathbf{N} = \mathbf{p} \times \mathbf{E}, \quad (23)$$

который стремится ориентировать диполь, в результате чего диполь приобретает потенциальную энергию

$$U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -pE \cos \theta. \quad (24)$$

Если диполь ориентирован вдоль силовых линий поля, так что  $\theta = 0$ , то его энергия  $U = -pE$  минимальна, и он может оставаться в этом состоянии неограниченно долго. Однородное электрическое поле не оказывает влияния на чистый квадруполь и мультиполи более высокого порядка, т. е. на них не действуют силы или моменты сил.

Рассмотрим теперь электрическое поле, направленное вдоль оси  $x$  и имеющее постоянный продольный градиент

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = \text{const}, \quad (25)$$

как показано на рис. 11.2. Одиночный заряд в таком поле будет, разумеется, двигаться с ускорением, причем последнее будет возрастать при движении в сторону увеличения поля и уменьшаться при

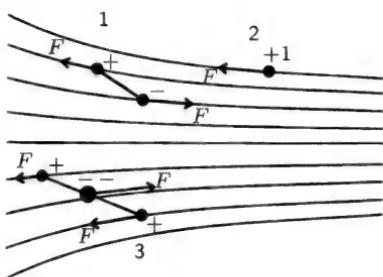


Рис. 11.2. Силы, действующие на электрический монополь, диполь и продольный квадруполь в электрическом поле с постоянным градиентом (напряженность поля увеличивается слева направо). Эти силы вызывают изменение ориентации и ускорение диполя (1), ускорение монополя (2) и изменение ориентации квадруполя (3).

движении в обратном направлении. Силы, действующие на составляющие диполь заряды, будут различны, как показано на рис. 11.2, поэтому сначала диполь станет поворачиваться в поле и одновременно ускоряться; после того как он ориентируется по полю, он продолжит ускоренное движение. В том же поле на квадруполь будет действовать только момент силы; под его влиянием квадруполь примет положение с наименьшей энергией и в дальнейшем будет оставаться неподвижным. Электрическое поле с постоянным градиентом не оказывает воздействия на октуполи и мультипольные моменты более высокого порядка. Сказанное легко обобщается на случай более сильных градиентов и моментов более высокого порядка.

## 5. МАГНИТНЫЕ МУЛЬТИПОЛИ

После обсуждения свойств электрических мультипольных моментов уместно рассмотреть их магнитные аналоги. Существуют принципиальные различия между этими видами мультиполей, обусловленные тем, что магнитный монополь не существует и магнитные мультипольные моменты более высокого порядка возникают вследствие движения электрических зарядов или токов. Вместе с тем имеется много общего, поскольку соотношения между магнитными моментами и магнитными полями аналогичны соотношениям для электрических моментов и полей. Сначала мы обсудим существующие сходства, а затем обратимся к анализу указанных различий.

Составляющие поля магнитного диполя  $\mu = \mu \mathbf{k}$ , ориентированного вдоль оси  $z$ , имеют в сферических координатах тот же вид, что и их электрические аналоги (19)

$$B_r = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu \cos \theta}{r^3}, \quad (26a)$$

$$B_\theta = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu \sin \theta}{r^3}, \quad (26b)$$

$$B_\varphi = 0. \quad (26c)$$

Здесь не следует путать магнитный момент  $\mu$  с абсолютной магнитной проницаемостью  $\mu$ .

Энергия взаимодействия двух магнитных диполей  $\mu_1$  и  $\mu_2$  обусловлена взаимодействием каждого из них с полем другого диполя, т. е.  $U_{dd} = -\mu_1 \cdot \mathbf{B}_2 = -\mu_2 \cdot \mathbf{B}_1$ :

$$U_{dd} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_1 \cdot \mu_2 - 3(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mu_1)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mu_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \quad (27)$$

что вполне аналогично взаимодействию электрических диполей (22).

Выражения для момента силы  $\mathbf{N}$  и энергии  $U$  магнитного диполя  $\mu$  в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{N} = \mu \times \mathbf{B}, \quad (28)$$

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\mu B \cos \theta \quad (29)$$

имеют тот же вид, что и их электрические аналоги (23) и (24), соответственно. Возникновение у атома с полным моментом  $\mathbf{J}$  добавки  $U$  к энергии в магнитном поле приводит к расщеплению уровней, называемому в квантовой физике эффектом Зеемана. Величина  $U$  может принимать всего  $2J + 1$  дискретных значений  $U = g\mu_B M_J$ , где  $-J \leq M_J \leq +J$ .

## 6. МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ

Наличие плотности электрического тока  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  приводит к возникновению намагниченности  $\mathbf{M}$

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{J}(\mathbf{r}); \quad (30)$$

таким образом, с плотностью тока связан магнитный дипольный момент  $\mu$

$$\mu = \frac{1}{2} \int \mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (31)$$

Проинтегрировав это выражение, легко найти величину магнитного момента контура радиусом  $a$  с током  $I$

$$\mu = \pi a^2 I, \quad (32)$$

где вектор  $\mu$  направлен перпендикулярно плоскости контура. В случае плоского контура произвольной формы

$$\mu = I \times (\text{площадь}), \quad (33)$$

где имеется в виду площадь, ограниченная контуром. Вращающаяся система зарядов (например, вращающийся заряженный шар) эквивалентна системе контуров с током, так что магнитный момент такой системы будет направлен вдоль оси вращения.

Выше рассматривался классический магнитный момент. В квантовой механике магнитный момент пропорционален орбитальному моменту, величина которого квантуется. Электрон с массой  $m$ , зарядом  $e$  и орбитальным моментом  $\hbar\mathbf{L}$  будет иметь магнитный момент

$$\mu = \mu_B \mathbf{L}, \quad (34)$$

где  $\mu_B = e\hbar/2m$  — единичный магнитный момент, называемый магнетоном Бора. В случае собственного вращения (спина), характеризуемого моментом  $\hbar\mathbf{S}$ , имеем

$$\mu = g\mu_B \mathbf{S}, \quad (35)$$

где безразмерный  $g$ -фактор в классическом случае и в случае орбитального движения (34) имеет значение  $g = 1$ , а в случае собственного вращения, т. е. спина,  $g = 2$ . Более точно для свободного электрона первые пять значащих цифр  $g$ -фактора таковы:  $g = 2,0023$ .

Первые экспериментальные доказательства существования спина у электрона восходят к опыту Штерна–Герлаха. В этом эксперименте пучок нейтральных атомов серебра, находившихся в основном состоянии  $^2S_{1/2}$  с  $L = 0$  и  $S = \frac{1}{2}$ , пропускался через сильно неоднородное магнитное поле. Из-за градиента магнитного поля возникает сила

$$F = \pm \mu \frac{\partial B}{\partial x}, \quad (36)$$

направления которой для двух возможных ориентаций спина  $M_S = \pm \frac{1}{2}$  противоположны. Измерение отклонения пучка показало, что магнитный момент атома серебра равен магнетону Бора  $\mu_B$ .

## 7. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ И МАГНИТНАЯ ПРОНИЦАЕМОСТИ

Все среды, кроме вакуума, в микроскопических (атомных) масштабах могут обладать распределением электрических дипольных моментов, что приводит к возникновению электрического дипольного момента единицы объема среды, называемого диэлектрической поляризацией  $P$ . Точно так же атомы среды могут иметь спин, и в среде в молекулярном масштабе могут течь электрические токи, что приводит к возникновению намагниченности  $M$ , определяемой как магнитный дипольный момент единицы объема среды. Эти факторы учитываются диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  и магнитной проницаемостью  $\mu$ , или же безразмерными восприимчивостями  $\chi_e$  и  $\chi$ , соответственно, о чём говорилось в разд. 5 предыдущей главы.

Восприимчивость является количественной характеристикой отличия данной среды от вакуума. Многие из обычных веществ обладают диэлектрической восприимчивостью, составляющей от 1 до 10, причем большинство немагнитных материалов являются диамагнетиками, т. е. имеют отрицательную магнитную восприимчивость. Парамагнитные материалы имеют положительную магнитную восприимчивость; восприимчивость ферромагнитных материалов тоже положительна, а ее величина может достигать нескольких тысяч. Величины  $\epsilon$  и  $\mu$  могут существенно зависеть от частоты, и в некоторых случаях они могут быть комплексными:  $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ ,  $\mu = \mu' + i\mu''$ . Однако пока мы будем пренебречь мнимыми частями  $\epsilon''$  и  $\mu''$ .

Существует немало причин, по которым  $\epsilon$  и  $\mu$  играют важную роль в физике. Например, выражения для скорости света  $c = (1/\mu_0\epsilon_0)^{1/2}$  и импеданса вакуума  $\eta = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$  были использованы в разд. 5 предыдущей главы для определения численных значений  $\epsilon_0$  и  $\mu_0$ . Емкость  $C$  плоского конденсатора, состоящего из параллельных пластин площадью  $A$  на расстоянии  $d$  друг от друга, пропорциональна абсолютной диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  среды, заполняющей пространство между пластинами:

$$C = \epsilon A/d, \quad (37)$$

а индуктивность  $L$  соленоида длиной  $\ell$ , содержащего  $n$  витков площадью  $A$ , пропорциональна абсолютной магнитной проницаемости  $\mu$  среды, заполняющей катушку катушку соленоида:

$$L = \mu n^2 \ell A. \quad (38)$$

Эти выражения подсказывают метод экспериментального измерения значений  $\epsilon$  и  $\mu$  для конкретных материалов.

Сила кулоновского взаимодействия двух зарядов  $q$  и  $q'$ , находящихся на расстоянии  $r$  друг от друга, обратно пропорциональна диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  среды

$$F = \frac{qq'}{4\pi\epsilon^2}. \quad (39)$$

Интересным следствием наличия диэлектрической проницаемости в знаменателе закона Кулона является существование слабо связанных экситонов в твердом теле. Экситон представляет собой пару из электрона и дырки, которые взаимодействуют между собой по закону Кулона; его эффективная масса  $m^*$  меньше массы электрона  $m_e$ . Уровни энергии экситона определяются выражением, сходным с формулой для уровней энергии атома водорода:

$$E_n = -\frac{m^*e^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon)^2n^2}; \quad (40)$$

эти величины весьма малы из-за больших значений диэлектрической постоянной  $\epsilon$ , а радиусы  $r$  соответствующих орбит могут быть очень велики

$$r = n^2(\epsilon/\epsilon_0)(m_0/m^*)a_0; \quad (41)$$

здесь  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 = 0,53\text{\AA}$  — боровский радиус, и основному состоянию отвечает  $n = 1$ .

## 8. ЭЛЛИПСОИДЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

До сих пор неявно предполагалось, что электрическое поле внутри образца с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ , помещенного во внешнее электрическое поле  $E_0$ , составляет  $E_{\text{внут}} = (\epsilon/\epsilon_0)E_0$ . Точно так же неявно предполагалось, что магнитное поле внутри образца с магнитной проницаемостью  $\mu$ , помещенного во внешнее магнитное поле  $B_0$ , составляет  $B_{\text{внут}} = (\mu/\mu_0)B_0$ . Оба допущения, однако, весьма неточны, поскольку напряженности полей внутри образца существенно зависят от формы образца.

Прежде чем приступить к исследованию зависимости полей от формы образца следует отметить, что в вакууме поля  $(E_0, B_0)$  связаны с полями  $(D_0, H_0)$  обычным образом,

$$E_0 = D_0/\epsilon_0, \quad B_0 = \mu_0 H_0 \quad (42)$$

и что в среде удовлетворяются аналогичные соотношения

$$E_{\text{внут}} = D_{\text{внут}}/\epsilon \quad B_{\text{внут}} = \mu H_{\text{внут}}. \quad (43)$$

Зависимость от формы возникает из-за граничных условий, описанных в разд. 6 предыдущей главы; в силу этих условий в отсутствие поверхностных зарядов и токов ( $\sigma = 0, \mathbf{K} = 0$ ) нормальные компоненты полей  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}$  и тангенциальные компоненты полей  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  должны быть непрерывны на поверхности раздела, как это показано на рис. 10.1. Например, в случае длинного стержня, ориентированного вдоль силовых линий поля, граничные условия для электрического и магнитного полей будут иметь вид

$$\mathbf{E}_{\text{внут}} = \mathbf{E}_0 \quad \text{и} \quad \mathbf{D}_{\text{внут}} = \epsilon \mathbf{E}_0 \quad (44)$$

и

$$\mathbf{H}_{\text{внут}} = \mathbf{H}_0 \quad \text{и} \quad \mathbf{B}_{\text{внут}} = (\mu/\mu_0) \mathbf{B}_0 \quad (45)$$

соответственно.

В случае же тонкой пластины, ориентированной поперек силовых линий поля, для электрического и магнитного полей имеем

$$\mathbf{D}_{\text{внут}} = \mathbf{D}_0 \quad \text{и} \quad \mathbf{E}_{\text{внут}} = (\epsilon_0/\epsilon) \mathbf{E}_0 \quad (46)$$

и

$$\mathbf{B}_{\text{внут}} = \mathbf{B}_0 \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_{\text{внут}} = \mathbf{B}_0/\mu \quad (47)$$

соответственно.

Данные соотношения можно проверить, используя рис. 10.1 из предыдущей главы.

Длинный стержень можно рассматривать как предельный случай очень вытянутого эллипсоида с главными осями  $a = b \ll c$ , а тонкую пластину — как очень сильно сплющенный эллипсоид с  $a = b \gg c$ . Определенный интерес представляет случай произвольного эллипсоида, находящегося во внешнем поле, силовые линии которого ориентированы вдоль главной оси, поскольку в этой ситуации поле внутри эллипсоида оказывается однородным, а силовые линии поля в нем будут параллельны силовым линиям внешнего поля. В остальных случаях поле внутри образца, находящегося во внешнем поле, будет, вообще говоря, неоднородным, и его силовые линии могут быть не параллельны силовым линиям внешнего поля.

Эллипсоид во внешнем электрическом поле характеризуется коэффициентами деполяризации  $N_i$ , которые для трех главных направлений удовлетворяют условию нормировки

$$N_x + N_y + N_z = 1. \quad (48)$$

**Таблица 11.1.** Коэффициенты деполяризации и размагничивания  $N_i$  для вытянутого и сплющенного эллипсоидов вращения с полуосами  $a = b$  и  $c$ . Поправки  $\delta_i \ll 1$  приведены в предельных случаях диска ( $c \ll a$ ), шара ( $c \sim a$ ), и стержня ( $c \gg a$ ).

Тип эллипсоида	Условие	$N_{\parallel}$	$N_{\perp}$
Пластина	$c \Rightarrow 0$	1	0
Плоский диск	$c \ll a$	$1 - \delta_1$	$1/2\delta_1$
Сплющенный эллипсоид	$c \leq a$	$1/3 + \delta_2$	$1/3 - 1/2\delta_2$
Шар	$c = a$	$1/3$	$1/3$
Вытянутый эллипсоид	$c \geq a$	$1/3 - \delta_3$	$1/3 + 1/2\delta_3$
Стержень	$c \gg a$	$\delta_4$	$1/2(1 - \delta_4)$
Длинный стержень	$c \Rightarrow \infty$	0	$1/2$

Значение поправок:

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \frac{1}{2}\pi \ln \frac{c}{a}, \\ \delta_2 &= \frac{4}{15} \left(1 - \frac{c}{a}\right), \\ \delta_3 &= \frac{4}{15} \left(1 - \frac{a}{c}\right), \\ \delta_4 &= \left[\frac{1}{2} \ln \left(2 \frac{c^2}{a^2}\right) - 1\right] \frac{a^2}{c^2}.\end{aligned}$$

Для рассматриваемого случая аксиальной симметрии,  $a = b \neq c$ ,

$$N_x = N_y = N_{\perp} \quad \text{и} \quad N_z = N_{\parallel}, \quad (49)$$

и условие нормировки имеет вид

$$2N_{\perp} + N_{\parallel} = 1. \quad (50)$$

В табл. 11.1 приведены выражения для  $N_{\perp}$  и  $N_{\parallel}$  для различных ситуаций. На рис. 11.3 показано как  $N_{\perp}$  и  $N_{\parallel}$  зависят от соотношения  $c/a$  главных осей. Для стержня и пластины, о которых говорилось выше,

$$N_{\perp} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\delta_4 \quad N_{\parallel} = \delta_4 \quad \text{стержень}, \quad (51)$$

$$N_{\perp} = \frac{1}{2}\delta_1 \quad N_{\parallel} = 1 - \delta_1 \quad \text{пластина}, \quad (52)$$

в табл. 11.1 приведены значения поправок  $\delta_1 - \delta_4$  при условии  $\delta_i \ll 1$ .

Если главная полуось эллипсоида ориентирована параллельно внешнему электрическому полю  $E_0$ , то силовые линии полей  $D_{\text{внут}}$ ,

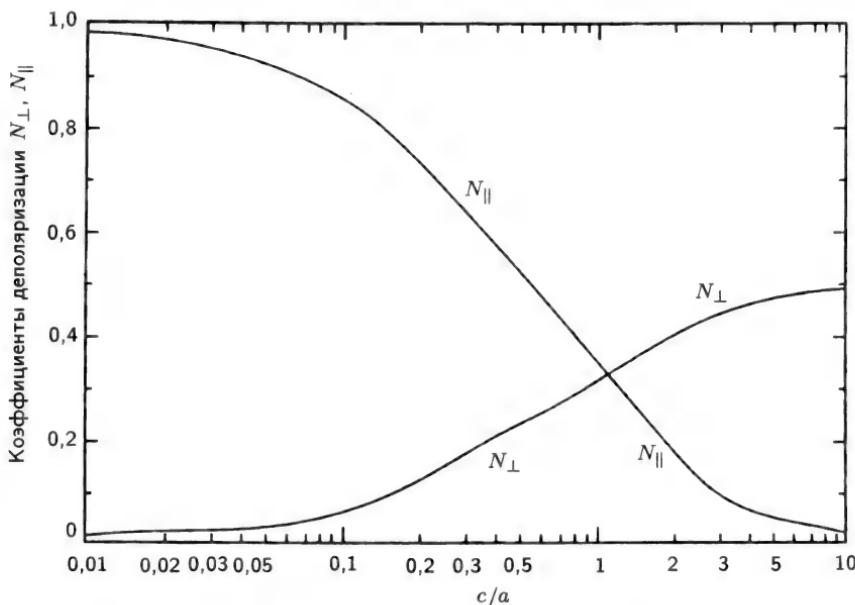


Рис. 11.3. Зависимость нормальной и тангенциальной компонент  $N_{\perp}$  и  $N_{\parallel}$  коэффициентов деполяризации и размагничивания от соотношения главных осей  $c/a$  эллипсоида. (Из книги: C. P. Poole, et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 327.)

$E_{\text{внут}}$  и  $P$  внутри эллипсоида будут параллельны полю  $E_0$ , причем первая пара этих полей связана между собой соотношением

$$ND_{\text{внут}} + (1 - N)\epsilon_0 E_{\text{внут}} = \epsilon_0 E_0, \quad (53)$$

где  $D_0 = \epsilon_0 E_0$  и  $D_{\text{внут}} = \epsilon E_{\text{внут}}$ . Если же направление главной оси эллипсоида не совпадает с направлением внешнего поля  $E_0$ , то силовые линии поля внутри эллипсоида, вообще говоря, не будут параллельны внешнему полю. Соотношения (44)–(47) получены для случая, когда внешнее поле направлено вдоль главной оси эллипсоида. Соотношение (44) для стержня, ориентированного вдоль поля, отвечает предельному случаю  $N_{\parallel} = 0$ ,  $\delta_4 = 0$ . При выводе равенства (46) для тонкой пластины было положено  $\delta_1 = 0$  и  $N_{\parallel} = 0$ . Соотношения (45) и (47) для магнитных полей получены аналогичным образом с использованием равенства (57), приводимого ниже. В случае шара  $a = b = c$  и все направления равноправны, так что

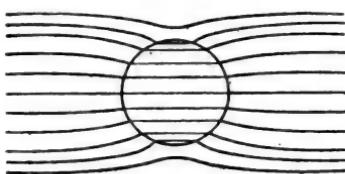


Рис. 11.4. Концентрация силовых линий электрического поля в шаре из диэлектрика, помещенного во внешнее электрическое поле. (Из книги: J. A. Stratton. Electromagnetic Theory, McGraw Hill, New York, 1941, p. 207.)

согласно (48)  $N = \frac{1}{3}$  и выражения для электрического поля внутри и поляризации имеют вид

$$E_{\text{внутр}} = \frac{3\epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0} E_0, \quad (54)$$

$$D_{\text{внутр}} = \frac{3\epsilon}{\epsilon + 2\epsilon_0} \epsilon_0 E_0 \quad (55)$$

и

$$P = \frac{3(\epsilon - \epsilon_0)}{\epsilon + 2\epsilon_0} \epsilon_0 E_0 \quad (56)$$

соответственно; все три величины постоянны в объеме шара. На рис. 11.4 показано, что силовые линии электрического поля концентрируются внутри диэлектрического шара.

Для образца из магнитного материала, помещенного во внешнее магнитное поле  $B_0$ , можно получить выражение, аналогичное равенству (53):

$$NB_{\text{внутр}} + (1 - N)\mu_0 H_{\text{внутр}} = B_0, \quad (57)$$

где  $N$  называется коэффициентом размагничивания.

Если использовать это соотношение совместно с (51) и (52), то при  $\delta_1 = 0$  и  $\delta_2 = 0$  из него легко получить выражения (45) и (47). Соотношения, аналогичные равенствам (54)–(56), также легко выводятся для шара в магнитном поле. Табл. 11.1 и рис. 11.3 остаются в силе и для магнитного поля.

Поскольку намагниченность может иметь место и в отсутствие внешнего магнитного поля, то полагая в равенстве (57)  $B_0 = 0$ , получим

$$\mu_0 H_{\text{внутр}} = -\frac{N}{1 - N} B_{\text{внутр}}; \quad (58)$$

теперь с помощью выражения  $B_{\text{внут}} = \mu_0(H_{\text{внут}} + M)$  можно определить намагниченность

$$\mu_0 M = \frac{B_{\text{внут}}}{1 - N}. \quad (59)$$

Таким образом, поле  $H_{\text{внут}}$  внутри тела направлено в противоположную сторону по отношению к  $B_{\text{внут}}$  и  $M$ . Для шара  $N = \frac{1}{3}$ , так что его магнитный момент  $\mu$  равен произведению намагниченности на его объем:

$$\mu = \frac{4}{3}\pi a^3 M. \quad (60)$$

## 9. МУЛЬТИПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ ЯДЕР И АТОМОВ

Электрический монопольный момент ядра с атомным номером  $Z$  совпадает с его полным зарядом  $Ze$ . У ядра не существует электрического дипольного момента, однако если его форма отклоняется от сферической, то возникает квадрупольный момент  $Q_{zz}$ , характеризующий степень этого отклонения. Ядро также не может иметь гексадекапольного момента. В общем случае ядро может обладать электрическими моментами только четного порядка ( $\ell$  — четное), все моменты нечетного порядка тождественно равны нулю.

С ядерным магнитным моментом все происходит наоборот, а именно отличны от нуля лишь магнитные моменты нечетного порядка ( $\ell$  — нечетное), ядро с нечетным числом протонов или нейтронов имеет отличные от нуля спин  $I$  и магнитный дипольный момент. Например, у ядра дейтерия спин  $I = 1$ , а магнитный дипольный момент обусловлен противоположно направленными магнитными моментами протона и нейтрона. Аналогичная ситуация имеет место и для изотопа азота —  $^{14}\text{N}$ , распространенность которого в природе составляет 99,63% — его ядро состоит из семи нейтронов и семи протонов и имеет спин  $I = 1$ . Все изотопы с  $I = 0$ , например  $^{12}\text{C}$  или  $^{16}\text{O}$ , имеют четное число и протонов, и нейтронов.

При столкновении с атомом фотона с частотой, соответствующей переходу между атомными уровнями, электрическое поле фотона  $E$  поляризует атом, при этом вероятность индуцированного перехода с уровня  $n$  на уровень  $n'$  вычисляется как квадрат модуля матричного элемента дипольного момента  $\langle n | \mathbf{p} | n' \rangle$ , где  $\mathbf{p}$  — электрический дипольный момент, индуцированный полем падающего излучения. Для электрического дипольного перехода правила отбора имеют вид  $\Delta\ell = \pm 1$  и  $\Delta j = 0, \pm 1$ . Могут также иметь место магнитные дипольные переходы  $\langle n | \mu | n' \rangle$ , и электрические квадрупольные

переходы  $\langle n|Q_{zz}|n'\rangle$ . Каждому типу переходов соответствуют свои специфические правила отбора, однако вероятность электрического дипольного перехода обычно существенно выше. Аналогичная ситуация имеет место и для атомного ядра, ибо переходы в этом случае могут быть обусловлены существованием ненулевых матричных элементов для различного типа электрических и магнитных моментов.

# ГЛАВА 12

---

## РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 7 мы обсудили основные аспекты специальной теории относительности. Наибольшее внимание уделялось 4-векторам и их использованию в механике; в то же время там почти не упоминались электрические и магнитные поля, а также тензоры более высокого ранга. В этой главе тензоры высших рангов будут рассмотрены более подробно; кроме того, обсуждаются и вопросы электродинамики, тесно связанные с теорией относительности. Так, например, уравнения Максвелла являются лоренц-инвариантными.

### 2. ТЕНЗОР ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Компоненты электромагнитного поля составляют антисимметричный тензор, контравариантные компоненты  $F^{\mu\nu}$  которого равны

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -cB_z & cB_y & E_x \\ cB_z & 0 & -cB_x & E_y \\ -cB_y & cB_x & 0 & E_z \\ -E_x & -E_y & -E_z & 0 \end{pmatrix}. \quad (1a)$$

Ковариантные компоненты этого тензора  $F_{\mu\nu} = g_{\mu\mu}F^{\mu\nu}$

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -cB_z & cB_y & -E_x \\ cB_z & 0 & -cB_x & E_y \\ -cB_y & cB_x & 0 & -E_z \\ E_x & E_y & E_z & 0 \end{pmatrix}, \quad (1b)$$

причем контравариантная и ковариантная формы метрического тензора ( $g^{\mu\nu}$  и  $g_{\mu\nu}$ , соответственно) совпадают между собой

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

При переходе к другой системе координат тензор  $F$  преобразуется в  $F'$  по правилам преобразования подобия

$$F' = S^{-1}FS. \quad (3)$$

Если переход связан с поворотом и равномерным прямолинейным движением новой координатной системы относительно старой, то  $S$  определяется матрицей обобщенного преобразования Лоренца  $L_G$

$$F' = L_G^{-1}FL_G. \quad (4)$$

Аналогичные выражения имеют место для чисто пространственных вращений  $R$ , а также для буста — разновидности преобразования Лоренца  $L$ , не связанного с вращением

$$F' = R^{-1}FR, \quad (5a)$$

$$F' = L^{-1}FL. \quad (5b)$$

Если оба преобразования  $R$  и  $L$  совершаются в направлении оси  $z$ , то их матрицы записываются в виде

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & -\beta\gamma \\ 0 & 0 & -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix}, \quad (7)$$

соответственно.

В качестве примера рассмотрим преобразование (5b) тензора электромагнитного поля при бусте (7); для простоты принимаем равными нулю две компоненты  $E_x = 0$  и  $B_x = 0$ . В результате

для тензора электромагнитного поля в новой системе координат получим

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -cB_z & \gamma cB_y & -\beta\gamma cB_y \\ cB_z & 0 & -\beta\gamma E_y & \gamma E_y \\ -\gamma cB_y & \beta\gamma E_y & 0 & E_z \\ \beta\gamma cB_y & -\gamma E_y & -E_z & 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

В более общем виде этот результат может быть записан через компоненты:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_{\parallel} &= \mathbf{E}_{\parallel} & \mathbf{B}'_{\parallel} &= \mathbf{B}_{\parallel} \\ \mathbf{E}'_{\perp} &= \gamma(\mathbf{E}_{\perp} + c\beta \times \mathbf{B}) & c\mathbf{B}'_{\perp} &= \gamma(c\mathbf{B}_{\perp} - \beta \times \mathbf{E}). \end{aligned} \quad (9)$$

Отсюда видно, что в отличие от случая 4-векторов преобразуются только компоненты поля, ортогональные вектору скорости  $\mathbf{v}$ , тогда как параллельные компоненты остаются неизменными.

В заключение отметим, что существует еще дуальный тензор электромагнитного поля  $\mathcal{F}$ , в котором поля  $E$  и  $B$  переставлены местами; его контравариантные компоненты имеют вид

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_z & -E_y & cB_x \\ -E_z & 0 & E_x & cB_y \\ E_y & -E_x & 0 & cB_z \\ -cB_x & -cB_y & -cB_z & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Этот тензор преобразуется, как обычный тензор электромагнитного поля. Получить этот тензор можно с помощью свертки

$$\mathcal{F}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}F_{\gamma\delta}, \quad (11)$$

где  $\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = 1$  для четной перестановки индексов,  $\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = -1$  для нечетной перестановки и  $\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = 0$  в случае, если два индекса совпадают.

### 3. ИНВАРИАНТЫ

Напомним, что квадрат 4-вектора инвариантен по отношению к пространственным вращениям и преобразованиям Лоренца. У антисимметричного тензора второго ранга имеются два инварианта. Первый получается сверткой тензора  $F_{\alpha\beta}$  с его контравариантной формой  $F^{\alpha\beta}$ , а второй — сверткой  $F_{\alpha\beta}$  с дуальным тензором  $\mathcal{F}^{\alpha\beta}$

$$\sum F_{\alpha\beta}F^{\alpha\beta} = 2(c^2B^2 - E^2), \quad (12)$$

$$\sum F_{\alpha\beta}\mathcal{F}^{\alpha\beta} = 4c\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}. \quad (13)$$

Квадрат 4-потенциала электромагнитного поля ( $\mathbf{A}$ ,  $\phi/c$ ) также является инвариантом

$$\sum A_\alpha^2 = A^2 - \phi^2/c^2. \quad (14)$$

Эти величины остаются инвариантными по отношению к пространственным вращениям и преобразованиям Лоренца.

Если в какой-либо системе отсчета поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  взаимно ортогональны, т. е.  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0$ , то они будут взаимно ортогональными в любой системе координат, причем существует система, при переходе к которой наименьшее из полей  $E$  или  $cB$  обращается в нуль. Если же поля в исходной системе не ортогональны, то не существует такой системы отсчета, в которой хотя бы одно из полей обратилось в нуль, поскольку величины  $c\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}$  и  $c^2B^2 - E^2$  должны оставаться неизменными.

В качестве примера рассмотрим поле с единственными отличными от нуля компонентами  $E_0$  и  $B_0$  вдоль оси  $y$ . Преобразование

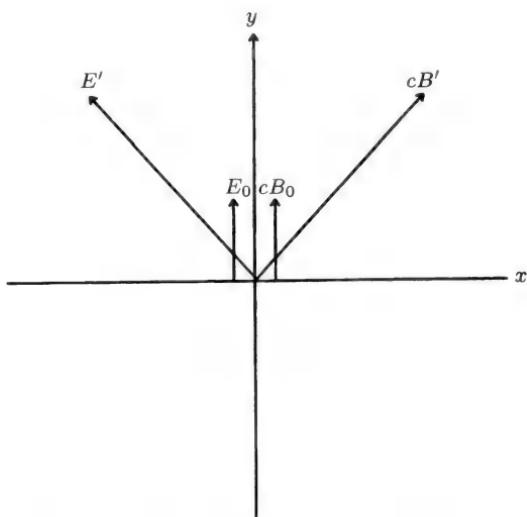


Рис. 12.1. Преобразование электрического  $E_0$  и магнитного  $B_0$  полей, ориентированных в исходной системе отсчета параллельно оси  $y$ , при переходе к системе отсчета, движущейся вдоль оси  $z$  со скоростью, близкой к скорости света.

Лоренца, связанное с движением вдоль оси  $z$ , дает

$$\begin{aligned} E'_x &= -\beta\gamma cB_0, & cB'_x &= \beta\gamma E_0, \\ E'_y &= \gamma E_0, & cB'_y &= \gamma B_0, \\ E'_z &= 0, & cB'_z &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Этот результат иллюстрируется на рис. 12.1. Видно, что при больших  $\gamma$  поля  $cB'$  и  $E'$  возрастают по величине и становятся почти ортогональными друг другу. Нетрудно также видеть, что инвариантность соблюдается:

$$c^2 B'^2 - E'^2 = c^2 B^2 - E^2, \quad (16)$$

$$c\mathbf{B}' \cdot \mathbf{E}' = c\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}. \quad (17)$$

#### 4. ТЕНЗОР ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ И ПОТЕНЦИАЛЫ

Тензор электромагнитного поля  $F_{\alpha\beta}(1, 2)$  связан с 4-потенциалом  $(\mathbf{A}, \phi/c)$  соотношением

$$F^{\alpha\beta} = c \left( \frac{\partial A^\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial A^\alpha}{\partial x_\beta} \right). \quad (18)$$

Дифференцирование этого тензора приводит к уравнениям Максвелла. 4-градиент

$$\sum_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} F^{\alpha\beta} = (\mu/\varepsilon)^{1/2} J^\beta \quad (19)$$

с учетом выражения для 4-вектора тока  $(\mathbf{J}, c\rho)$  приводит к неоднородным уравнениям

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J} \quad \beta = x, y, z, \quad (20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad \beta = t, \quad (21)$$

а соотношение

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} F_{\beta\gamma} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} F_{\gamma\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} F_{\alpha\beta} = 0 \quad (22)$$

дает однородные уравнения Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad \alpha, \beta, \gamma \text{ включают } t, \quad (23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \alpha, \beta, \gamma \neq t. \quad (24)$$

Неоднородные уравнения Максвелла можно также получить, дифференцируя дуальный тензор

$$\sum \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \mathcal{F}^{\alpha\beta} = 0, \quad (25)$$

что легко проверяется непосредственно.

## 5. КАЛИБРОВОЧНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Тензор электромагнитного поля (1), составленный из компонент полей  $E_i$  и  $B_i$ , не позволяет однозначно определить 4-вектор электромагнитного поля. Поскольку магнитное поле  $\mathbf{B}$  определяется ротором векторного потенциала  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (26)$$

то добавление к  $\mathbf{A}$  градиента произвольной скалярной функции  $\Lambda(x, y, z, t)$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (27)$$

не приведет к изменению  $\mathbf{B}$ . Чтобы эта процедура не нарушила справедливость уравнения

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (28)$$

для электрического поля, к потенциалу  $\phi$  должна быть добавлена производная по времени от  $\Lambda$ :

$$\phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \quad (29)$$

Соотношения (27) и (29) определяют калибровочное преобразование, превращающее потенциал  $(\mathbf{A}, \phi)$  в потенциал  $(\mathbf{A}', \phi')$ . Таким образом, уравнения Максвелла инвариантны относительно рассмотренного типа преобразований ввиду произвольной калибровки потенциала.

Для устранения неоднозначности 4-потенциала обычно требуют, чтобы он имел нулевую 4-дивергенцию

$$\square A = \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0; \quad (30)$$

это выражение называется условием Лоренца. Для устранения оставшейся неоднозначности можно потребовать, чтобы скалярная функция  $\Lambda$  удовлетворяла волновому уравнению

$$\nabla^2 \Lambda - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} = 0; \quad (31)$$

соотношения (28), (29), в которых скалярная функция  $\Lambda$  удовлетворяет уравнению (31), называются калибровкой Лоренца. Эта калибровка удобна в том отношении, что благодаря ей пространственная и времененная компоненты 4-потенциала удовлетворяют независимым волновым уравнениям

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\rho/\epsilon_0, \quad (32)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{J}. \quad (33)$$

При иных способах калибровки система волновых уравнений не распадается на независимые.

Другой метод устранения неоднозначности связан с выбором кулоновской калибровки, которая называется также калибровкой Лондона и состоит в выборе векторного потенциала с нулевой дивергенцией

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0; \quad (34)$$

в этом случае волновое уравнение (32) для скалярного потенциала становится не зависящим от времени:

$$\nabla^2 \phi = -\rho/\epsilon_0. \quad (35)$$

Эта калибровка используется в теории сверхпроводимости, о чём можно догадаться по ее названию.

## 6. ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯДА В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Рассмотрим заряд  $q$  с массой покоя  $m$ , движущийся в электромагнитном поле. Силу Лоренца  $K_\alpha$ , действующую на этот заряд, можно записать в виде

$$K_\alpha = \frac{dp_\alpha}{d\tau} = \frac{q}{c} \sum F_{\alpha\beta} u_\beta, \quad (36)$$

4-импульс  $p_\alpha$  имеет компоненты  $(m\gamma\mathbf{v}, m\gamma c)$ , 4-скорость — компоненты  $(\gamma\mathbf{v}, \gamma c)$  и собственное время  $d\tau = dt/\gamma$ . Отсюда для трех пространственных и одной временной компонент уравнения (36) следует:

$$m \frac{d}{dt} \gamma \mathbf{v} = \frac{q}{\gamma} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \alpha = x, y, z, \quad (37)$$

$$mc \frac{d\gamma}{dt} = \frac{q}{\gamma} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \quad \alpha = t.$$

Лагранжиан заряженной частицы равен

$$L = -\frac{mc^2}{\gamma} + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - q\phi; \quad (38)$$

гамильтониан же можно выразить через обобщенный импульс  $\mathbf{P}$

$$\mathbf{P} = \gamma m \mathbf{v} + q \mathbf{A} \quad (39)$$

в виде

$$\mathcal{H} = [(c\mathbf{P} - qc\mathbf{A})^2 + m^2 c^4]^{1/2} + q\phi. \quad (40)$$

При скоростях  $v \ll c$  в этом выражении преобладает член  $m^2 c^4$ , отвечающий энергии покоя, и его можно с хорошей точностью аппроксимировать выражением

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi + mc^2; \quad (41)$$

с помощью соответствующего оператора в квантовой механике описывается эффект Зеемана.

## 7. СКРЕЩЕННЫЕ ПОЛЯ

Перейдем теперь к изучению скрещенных полей  $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$ . Рассмотрим поле (8) после перехода к системе отсчета, движущейся со скоростью  $\beta = \mathbf{v}/c$  в направлении нормали к плоскости, в которой лежат векторы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_{\parallel} &= 0 & \mathbf{E}'_{\perp} &= \gamma(\mathbf{E}_{\perp} + \beta \times c\mathbf{B}), \\ \mathbf{B}'_{\parallel} &= 0 & c\mathbf{B}'_{\perp} &= \gamma(c\mathbf{B}_{\perp} - \beta \times \mathbf{E}); \end{aligned} \quad (42)$$

в этой системе отсчета параллельные компоненты полей остаются нулевыми.

Рассмотрим два случая, в одном из которых  $\mathbf{E}$  больше, чем  $c\mathbf{B}$ , а в другом — наоборот. Если  $|\mathbf{E}| < c\mathbf{B}$ , то, выбрав скорость системы отсчета равной

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}, \quad (43)$$

получим, что поле  $\mathbf{E}'_{\perp} = 0$ , и

$$\mathbf{B}'_{\perp} = \frac{\mathbf{B}_{\perp}}{\gamma} = \left\{ \frac{c^2 B^2 - E^2}{c^2 B^2} \right\} \mathbf{B}_{\perp}. \quad (44)$$

Поскольку электрическое поле  $\mathbf{E}$  в новой системе отсчета отсутствует, то заряд будет двигаться в магнитном поле  $\mathbf{B}$  (в этой системе),

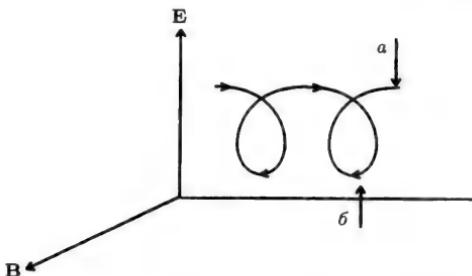


Рис. 12.2. Движение заряженной частицы в скрещенных полях в случае, когда  $|E| < c|B|$ . Движение по окружности накладывается на поступательное перемещение в направлении, перпендикулярном  $E$  и  $B$ .  
а — траектория с большим радиусом; б — траектория с малым радиусом.

по окружности. На это движение наложится поступательное движение в направлении, перпендикулярном полям  $B$  и  $E$ , как показано на рис. 12.2.

В случае же, когда  $|E| > cB$ , скорость системы отсчета можно выбрать равной

$$v = c^2 \frac{E \times B}{E^2}; \quad (45)$$

в результате поле  $B'_{\perp} = 0$ , и для электрического поля  $E'_{\perp}$  в новой системе отсчета

$$E'_{\perp} = \frac{E_{\perp}}{\gamma} = \left\{ \frac{E^2 - c^2 B^2}{E^2} \right\} E_{\perp}. \quad (46)$$

Частица движется в таком поле по гиперболе со все возрастающей скоростью.

## 8. АДИАБАТИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ

Если заряженная частица совершает движение по круговой орбите, перпендикулярной силовым линиям магнитного поля, а поле медленно увеличивается с расстоянием, как показано на рис. 12.3, то траектория движения такой частицы будет иметь форму спирали, причем частица может испытать отражение от области, в которой величина поля достигнет некоторого критического значения.

Характер такого движения можно проанализировать, воспользовавшись адиабатической инвариантностью действия  $J$

$$J = \oint \mathbf{P}_{\perp} \cdot d\ell, \quad (47)$$

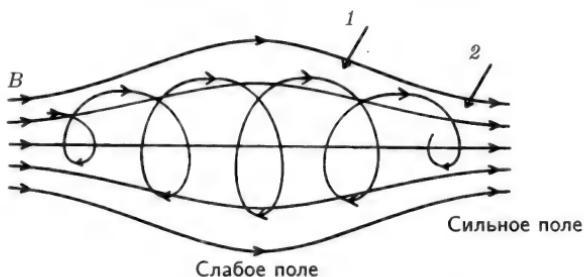


Рис. 12.3. Спиральное движение частицы в ловушке, образованной продольным магнитным полем  $B$ , слабым в центре и возрастающим к краям. 1 —  $v_{\parallel}$  — велико,  $v_{\perp}$  — мало; 2 — область отражения,  $v_{\perp}$  — велико,  $v_{\parallel} = 0$

где  $\mathbf{P}$  — обобщенный импульс (39). Поскольку векторы  $\mathbf{v}_{\perp}$  и  $d\mathbf{r}$  коллинеарны и

$$\omega_B = eB/\gamma m_0 c = v_{\perp}/a, \quad (48)$$

где  $a$  — радиус орбиты, то, как показывает весьма кропотливый анализ,

$$J = qB\pi a^2, \quad (49)$$

и, следовательно, радиус  $a$  уменьшается с увеличением поля  $B$ . Кинетическая энергия частицы также сохраняется, поскольку

$$v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2 = v_0^2, \quad (50)$$

где  $v_0$  — начальная скорость, с которой частица была захвачена магнитным полем. Поскольку заряженная частица движется по спирали в направлении возрастания поля, радиус спирали  $a$  уменьшается в соответствии с (49), а поперечная компонента скорости  $v_{\perp}$  — увеличивается согласно (48). Движение по спирали продолжается до тех пор, пока  $v_{\perp}$  не достигнет по величине начальной скорости  $v_0$ ; в этот момент  $v_{\parallel}$  обращается в нуль согласно (50), заряд останавливается и начинает двигаться по спирали в обратном направлении в сторону уменьшения поля. Если поле достаточно слабое в центре некоторой области и возрастает по мере приближения к ее краям, то заряженная частица может совершать возвратно-поступательное движение по спирали, т. е. оказывается захваченной в ловушку, как показано на рис. 12.3.

## ВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В данной главе рассматриваются процессы распространения плоских волн в пустом пространстве и различных средах, в частности в диэлектриках. Анализируются разнообразные явления, изучаемые обычно в оптике, а также распространение волн в проводящих средах и волноводах. В заключение обсуждаются модулированные волны и солитоны.

### 2. ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ

Распространяющаяся в пространстве плоская волна характеризуется следующей зависимостью от координат и времени:

$$I(\mathbf{r}, t) = I_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}; \quad (1)$$

в одномерном случае эта зависимость имеет вид

$$I = I_0 e^{ikx - i\omega t}. \quad (2)$$

Такая волна распространяется вправо, в направлении положительных значений  $x$ . Волна, бегущая влево, записывается в виде

$$I = I_0 e^{-ikx - i\omega t}. \quad (3)$$

Сумма и разность бегущих волн (2) и (3) представляют собой стоячую волну:

$$I = 2I_0 \cos(kx - \omega t) \quad (\text{сумма}), \quad (4)$$

$$I = 2iI_0 \sin(kx - \omega t) \quad (\text{разность}). \quad (5)$$

Мы имеем дело с электромагнитными волнами, скорость распространения которых в пустом пространстве равна  $c$ . Величина  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$  представляет собой скалярное произведение 4-векторов,

характеризующих распространение волны в пространстве и во времени, а именно векторов  $(\mathbf{r}, \omega t)$  и  $(\mathbf{k}, \omega/c)$  (гл. 7.).

В пустом пространстве скорость света есть

$$c = 1/(\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}, \quad (6)$$

в среде она равна

$$v = \frac{c}{[(\mu/\mu_0)(\epsilon/\epsilon_0)]^{1/2}} = \quad (7)$$

$$= c/n, \quad (8)$$

где  $n$  — показатель преломления немагнитной среды с  $\mu = \mu_0$ . ( $\epsilon$  и  $\mu$  — абсолютные проницаемости, в дальнейшем — просто проницаемости.)

$$n = (\epsilon/\epsilon_0)^{1/2} \quad (9)$$

Кроме того,

$$\lambda \nu = v, \quad (10a)$$

$$\omega = v k, \quad (10b)$$

где  $\omega = 2\pi\nu$  и  $k = 2\pi/\lambda$ . В диэлектрической среде частота волны сохраняется, а скорость распространения уменьшается в соответствии с выражением (8); длина волны  $\lambda$  в среде по сравнению с длиной волны  $\lambda_0$  в пустом пространстве уменьшается в  $n$  раз:

$$\lambda = \lambda_0/n. \quad (11)$$

Плотность потока энергии, переносимого плоской электромагнитной волной в пустом пространстве, характеризуется вектором Пойнгтинга  $\Pi$ :

$$\Pi = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad \text{Дж}/\text{м}^2 \cdot \text{с}, \quad (12)$$

а электромагнитный импульс волны  $\mathbf{g}$  определяется аналогичным выражением:

$$\mathbf{g} = \mathbf{D} \times \mathbf{B} = \Pi/c^2 \quad \text{Дж} \cdot \text{с}/\text{м}^4. \quad (13)$$

Отношение напряженности электрического поля к напряженности магнитного поля равно  $(\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$ . Эта величина называется волновым сопротивлением пустого пространства (вакуума):

$$E/H = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2} = 120\pi \quad \text{Ом}. \quad (14)$$

При распространении в немагнитной среде ( $\mu = \mu_0$ )

$$E/H = 120\pi/n \quad \text{Ом}. \quad (15)$$

Здесь  $n$  — показатель преломления (9).

### 3. ОТРАЖЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЕ ВОЛН

Хорошо известен основной закон отражения, согласно которому угол падения равен углу отражения (рис. 13.1). Преломление на границе раздела двух сред с соответствующими показателями преломления  $n_1$  и  $n_2$  и магнитными проницаемостями  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$  описывается законом Снелла

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2. \quad (16)$$

Этот закон иллюстрируется рис. 13.2. Его нетрудно вывести, если предположить, что свет проходит от точки  $P_1$  в среде 1 до точки  $P_2$  в среде 2 за минимальное время. Иными словами, сумма времени  $t_1$ , затрачиваемого светом в среде 1, и времени, затрачиваемого в среде 2, минимальна:

$$t_1 + t_2 = \min. \quad (17)$$

Когда свет последовательно проходит несколько сред, оптическая длина пути  $OPL$ , определяемая как

$$OPL = \sum_{n_i s_i}, \quad (18)$$

минимальна; здесь  $s_i$  — длина пути в среде  $i$  с показателем преломления  $n_i$ . Если преломление происходит на границе оптически более плотной среды (с более высоким показателем преломления) с менее плотной средой, т. е.  $n_2 < n_1$ , то существует критический угол падения  $\theta_1 = i_c$ , при котором угол преломления  $\theta_2$  становится равным  $\pi/2$ . Это условие записывается в виде

$$\sin i_c = n_2/n_1. \quad (19)$$

Таким образом, световые пучки с углом падения  $\theta > i_c$  не могут преломляться в среду с  $n_2$ . Пучок с  $i_c < \theta < \pi/2$  полностью отражается.

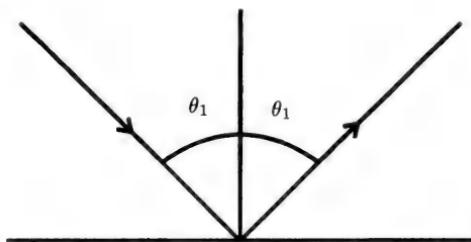


Рис. 13.1. Отражение света на поверхности.

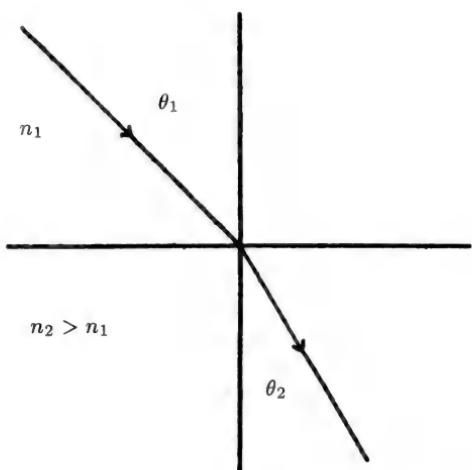


Рис. 13.2. Преломление светового пучка на границе двух сред. Свет выходит из среды с более низким показателем преломления  $n_1$  и попадает в среду с более высоким значением  $n_2$ .

Рассмотрим плоскую волну с вектором Пойнтинга  $\Pi = \mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0$  в среде с показателем преломления  $n_0$ , которая по нормали падает на границу раздела со средой, имеющей показатель преломления  $n_i$ . В этом случае могут существовать прошедшая (преломленная) волна  $\mathbf{E}_t \times \mathbf{H}_t$  и отраженная волна  $\mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_r$ . Электрическое и магнитное поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  параллельны границе раздела, так что граничные условия имеют вид

$$E_0 \pm E_r = E_t, \quad (20)$$

$$H_0 \mp H_r = H_t. \quad (21)$$

Знаки  $\pm$  и  $\mp$  обусловлены тем, что направление распространения отраженной волны противоположно направлению распространения падающей волны, и либо  $H_0$  и  $H_r$  параллельны, а  $E_0$  и  $E_r$  антипараллельны, либо наоборот. Верхний знак выбирается, когда  $n_0 > n_t$ ; тогда в обоих случаях отраженная  $E_r$  и преломленная  $E_t$  волны имеют вид

$$E_r = \frac{n_0 - n_t}{n_0 + n_t} E_0, \quad (22)$$

$$E_t = \frac{2n_0}{n_0 + n_t} E_0. \quad (23)$$

Рассмотрим поведение амплитуд на границе раздела. Представляет также интерес поток энергии через границу раздела двух сред. Интенсивность  $I$  волны пропорциональна квадрату амплитуды, и в силу сохранения энергии поток энергии в отраженной и преломленной волнах должен быть в сумме равен потоку энергии падающей волны:

$$n_0 I_0 = n_0 I_r + n_t I_t, \quad (24)$$

$$n_0 E_0^2 = n_0 E_r^2 + n_t E_t^2. \quad (25)$$

Коэффициенты отражения  $R$  и пропускания  $T$  можно определить через интенсивность, учитывая, что

$$R + T = 1. \quad (26)$$

Таким образом,

$$R = \frac{E_r^2}{E_0^2}, \quad (27)$$

$$T = \frac{n_t E_t^2}{n_0 E_0^2}. \quad (28)$$

Эти выражения можно проверить с помощью формул (22) и (23).

#### 4. ОТРАЖЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЕ ПРИ НАКЛОННОМ ПАДЕНИИ ВОЛНЫ

При угле падения  $i$  и угле преломления  $r$  возможны два случая. Во-первых, если поле  $E$  перпендикулярно плоскости падения, имеем

$$E_r = \frac{n_0 \cos i - n_t \cos r}{n_0 \cos i + n_t \cos r} E_0, \quad (29a)$$

$$E_t = \frac{2n_0 \cos i}{n_0 \cos i + n_t \cos r} E_0 \quad (29b)$$

и, во-вторых, если поле  $E$  параллельно плоскости падения, то

$$E_r = \frac{n_t \cos i - n_0 \cos r}{n_t \cos i + n_0 \cos r} E_0, \quad (30a)$$

$$E_t = \frac{2n_0 \cos i}{n_t \cos i + n_0 \cos r} E_0. \quad (30b)$$

В случае нормального падения волны, когда  $i = r = \frac{1}{2}\pi$ , эти выражения сводятся к формулам (22) и (23).

В частном случае отражения от воздуха ( $n_0 \approx 1$ ) из среды с  $n_t > 1$  согласно закону Снелла  $n_0 \sin i = n_t \sin r$  и мы имеем

$$\sin i > \sin r, \quad (31)$$

$$\cos i < \cos r. \quad (32)$$

В этих условиях амплитуда  $E_r$  отраженной волны может быть равна нулю, если поле  $E$  параллельно плоскости падения в соответствии с равенством

$$n_t \cos i = n_0 \cos r. \quad (33)$$

Это происходит при угле Брюстера  $i = i_B$ , когда падающий и отраженный лучи составляют угол  $\frac{1}{2}\pi$  (т. е.  $\theta_1 + \theta_2 = \frac{1}{2}\pi$  на рис. 13.2). Таким образом,  $i_B + r = \frac{1}{2}\pi$ , так что  $\cos r = \sin i_B$  и

$$\operatorname{tg} i_B = n_t / n_0. \quad (34)$$

Если неполяризованный свет падает под этим углом, отраженный пучок имеет 100%-ную поляризацию в плоскости, перпендикулярной плоскости падения. В случае перпендикулярной поляризации нельзя получить  $E_r = 0$ , поскольку для этого требуется  $\cos i = n_t \cos r$ , а согласно неравенству (32)  $\cos i$  меньше  $\cos r$ .

## 5. ПОЛЯРИЗАЦИЯ

Электромагнитная волна, распространяясь в пространстве, взаимодействует с присутствующими в этой области зарядами и токами. Сила  $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$ , действующая со стороны волны, может сместить внешнее электронное облако атома с отрицательным зарядом  $-q$  на расстояние  $\Delta x$  относительно положительно заряженного ядра  $+q$ , создавая таким образом у атома электрический дипольный момент  $\mathbf{p} = q\Delta x$ , определяемый выражением

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}, \quad (35)$$

где  $\alpha$  — поляризуемость. Если рассматривать атом как связанный заряд с возвращающей силой  $\mathbf{F} = -m\omega_0^2 \mathbf{r}$ , совершающий гармонические колебания, то можно написать

$$e\mathbf{E} = m\omega_0^2 \mathbf{r} \quad (36)$$

и сравнение (35) и (36) для дипольного момента  $\mathbf{p} = e\mathbf{r}$  дает следующее выражение для поляризуемости:

$$\alpha = e^2 / m\omega_0^2. \quad (37)$$

Распределение диполей в среде создает дипольный момент единицы объема, называемый поляризацией  $P$ , и

$$D = \epsilon E = \epsilon_0 E + P. \quad (38)$$

Если в среде присутствуют молекулы с постоянными дипольными моментами, то они будут ориентироваться во внешнем электрическом поле  $E$  и давать вклад в поляризацию и диэлектрическую проницаемость  $\epsilon$ .

Если электрическое поле волны, распространяющейся в среде, осциллирует достаточно медленно, то заряды смещаются вслед за волной. При очень низких частотах диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  высока, поскольку все постоянные диполи и возникающие в результате поляризации заряды могут следовать за полем падающей волны. С увеличением частоты волны некоторые заряды не успевают уже следовать за быстрыми колебаниями и, таким образом, не будут давать вклада в  $\epsilon$ . Это приводит к «выключению» некоторых механизмов поглощения, таких как вращения молекул и молекулярных групп в микроволновой области спектра ( $\approx 10^{11}$  Гц), колебаний в инфракрасной области ( $\approx 10^{13}$  Гц) и электронных переходов в видимой области и ближнем ультрафиолете ( $\approx 10^{15}$  Гц). При очень высоких частотах и в рентгеновской области заряды не испытывают воздействия распространяющейся в среде волны, и величина  $\epsilon$  принимает значение электрической постоянной  $\epsilon_0$ .

## 6. ПОГЛОЩЕНИЕ И ДИСПЕРСИЯ

Диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  имеет действительную  $\epsilon'$  и мнимую  $\epsilon''$  части. Действительная часть  $\epsilon'$  — это обычно то, что мы называем под диэлектрической проницаемостью; она определяет скорость и длину электромагнитной волны в среде. Мнимая часть  $\epsilon''$  отвечает за поглощение в среде, например за потери в конденсаторе, за нагрев микроволновой печи и т. д. В отсутствие поглощения  $\epsilon'' = 0$ , и если среда немагнитная с  $\mu = \mu_0$ , то мы имеем следующее выражение для волнового числа  $k$ :

$$k = (\epsilon'/\epsilon_0)^{1/2} \omega/c. \quad (39)$$

Если учитывается мнимая часть  $\epsilon''$  величины  $\epsilon$ , то  $k$  становится комплексной величиной и ее можно записать как сумму волнового числа  $\beta$  и коэффициента поглощения  $\alpha$ :

$$k = \beta + i\alpha = [(\epsilon' + i\epsilon'')/\epsilon_0]^{1/2} \omega/c. \quad (40)$$

При этом распространяющееся электрическое поле равно

$$E = E_0 e^{i\beta x - \alpha x - i\omega t}. \quad (41)$$

Если поглощение слабое ( $\epsilon'' \ll \epsilon'$ ), то, используя разложение в степенной ряд, имеем

$$\alpha \approx \frac{1}{2} \beta (\epsilon'' / \epsilon'). \quad (42)$$

Действительная  $\epsilon'$  и мнимая  $\epsilon''$  части диэлектрической проницаемости не являются независимыми; они связаны соотношениями Крамерса—Кронига

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_0 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int \frac{\omega' \epsilon''(\omega') d\omega'}{\omega' 2 - \omega^2}, \quad (43)$$

$$\epsilon''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int \frac{[\epsilon'(\omega') - \epsilon_0] d\omega'}{\omega' 2 - \omega^2}, \quad (44)$$

где  $\mathcal{P}$  — главное значение интеграла.

Простая модель диэлектрической проницаемости предполагает, что на электронный заряд, взаимодействующий с электрическим полем  $E$  падающей волны, действует гармоническая возвращающая сила с собственной частотой  $\omega_0$  (36), а с учетом коэффициента затухания  $\gamma$  уравнение движения принимает вид

$$m(\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x) = -eE_x e^{-i\omega t}. \quad (45)$$

Это уравнение имеет решение  $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$ , и наведенный дипольный момент  $p$  дается выражением

$$p_x = -ex = \frac{e^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} E_x. \quad (46)$$

Если единица объема среды содержит  $N$  молекул и на каждую молекулу приходится  $Z$  электронов со своими собственными частотами  $\omega_j$  и коэффициентами затухания  $\gamma_j$ , то узкому резонансу ( $\gamma_j \ll \omega_j$ ) отвечает лоренцева форма линии:

$$\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{Ne^2}{m} \sum \frac{f_j}{2\omega_j} \left[ \frac{(\omega_j - \omega) + \frac{1}{2}i\gamma}{(\omega_j - \omega)^2 + \left(\frac{1}{2}\gamma\right)^2} \right], \quad (47)$$

где силы осцилляторов  $f_j$  электронов удовлетворяют правилу сумм

$$\sum f_j = Z. \quad (48)$$

Из рис. 13.3, *a* видно, что для этой модели в широком диапазоне частот вещественная часть диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$

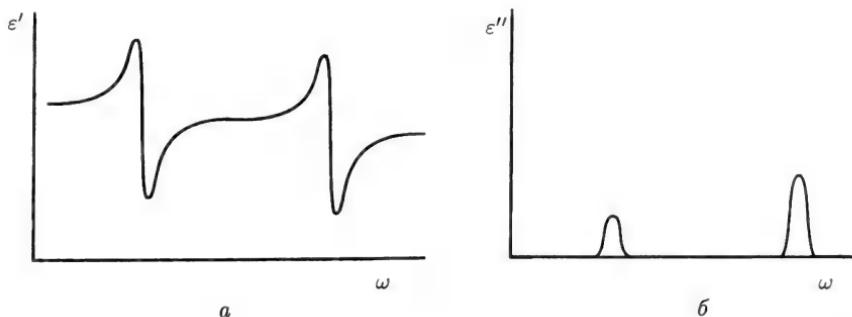


Рис. 13.3. Частотная зависимость вещественной части  $\epsilon'$  (а) и мнимой части  $\epsilon''$  (б) комплексной диэлектрической проницаемости  $\epsilon = \epsilon' + \epsilon''$  в окрестности двух резонансов.

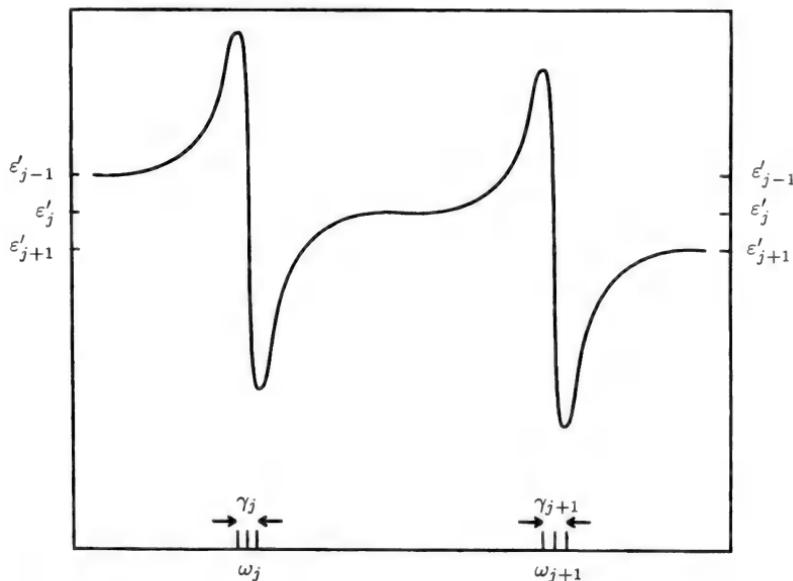


Рис. 13.4. Детали частотной зависимости вещественной части диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  между двумя резонансами при  $\omega_j$  и  $\omega_{j+1}$  для узкой лоренцевой линии, представленной выражением (47).

постепенно уменьшается и дает всплески на каждой резонансной частоте  $\omega_j$ . Мнимая же часть становится значительной лишь вблизи резонансов, как показано на рис. 13.3, б. Более подробно поведение вещественной части  $\epsilon'$  в этой модели изображено на рис. 13.4. Между резонансами она постепенно увеличивается с частотой до тех пор, пока не достигает максимального значения при частоте  $\omega = \omega_j - \frac{1}{2}\gamma_j$  для резонанса, расположенного при  $\omega_j$ . После этого максимума величина  $\epsilon'$  резко падает до минимума при  $\omega = \omega_j + \frac{1}{2}\gamma_j$ , после чего она вновь постепенно возрастает до следующего резонанса при  $\omega_{j+1}$ .

## 7. ПРОВОДЯЩАЯ СРЕДА

В случае проводящей среды, уравнение Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (49)$$

для гармонической зависимости от времени  $e^{-i\omega t}$  сводится к

$$\nabla \times \mathbf{H} = (\sigma - i\omega\epsilon)\mathbf{E} = \quad (50)$$

$$= -i\omega\epsilon E \left( 1 + \frac{i\sigma}{\omega\epsilon} \right); \quad (51)$$

здесь использованы закон Ома  $\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$  и выражение  $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ . Видно, что проводимость  $\sigma$  вызывает потери, и коэффициент поглощения  $\alpha$  проводника зависит от наличия конечной проводимости.

Создающие ток электроны перемещаются в окрестности положительно заряженных ядер и тем самым создают электрически нейтральную систему подвижных зарядов, называемую плазмой. На высоких частотах эта среда характеризуется диэлектрической проницаемостью

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right), \quad (52)$$

где  $\omega_p$  — плазменная частота, определяемая выражением

$$\omega_p = (Ne^2/\epsilon_0 m)^{1/2}. \quad (53)$$

Ниже плазменной частоты  $\omega < \omega_p$  волновое число оказывается чисто мнимым, и электромагнитные волны затухают, т. е. проводник непрозрачен для них. Выше частоты  $\omega_p$  в ультрафиолетовой области вещество становится прозрачным. Экспериментально найденные плазменные частоты  $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$  у щелочных металлов лежат в диапазоне от 2000 Å для Li до 4400 Å для Cs.

## 8. ВОЛНОВОДЫ

Электромагнитная волна распространяется в пустом пространстве со скоростью света  $c$ , причем произведение ее длины волны  $\lambda$  на частоту  $\nu$  дается выражением

$$\lambda\nu = c = 1/(\mu_0\epsilon_0)^{1/2}. \quad (54)$$

По своей природе эта волна является поперечной электромагнитной волной, а это значит, что ее электрическое поле  $E$  перпендикулярно магнитному полю  $H$ , причем каждое из них ортогонально направлению распространения вдоль оси  $z$ , и отношение амплитуд электрического и магнитного полей равно характеристическому импедансу пустого пространства (вакуума)

$$E_0/H_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2} = 120\pi\text{Ом}. \quad (55)$$

Если волна распространяется в полой трубе, называемой волноводом, ее скорость  $v_g$  уменьшается, а длина волны  $\lambda_g$  оказывается больше, чем в неограниченном пространстве. Пусть волновод имеет прямоугольное сечение. В этом случае существует предельная (критическая) длина волны  $\lambda_c$ . Электромагнитные волны с длиной больше  $\lambda_c$  не могут распространяться в волноводе. Упомянутые три длины волны связаны соотношением

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{1}{\lambda_g^2} + \frac{1}{\lambda_c^2}. \quad (56)$$

Волны, которые могут распространяться в волноводах, будут либо поперечными электрическими (ТЕ-волнами) с составляющей поля  $H$  вдоль направления распространения, либо поперечными магнитными (ТМ-волнами) с составляющей поля  $E$  вдоль направления распространения. В волноводах круглого поперечного сечения изменение амплитуд в радиальном направлении описывается функциями Бесселя. В прямоугольном волноводе с размерами  $a < b$  основная мода колебаний, т. е. мода с наименьшей критической длиной волны  $\lambda_c$ , относится к ТЕ-типу, т. е. является поперечной электрической, причем составляющие магнитного и электрического полей даются выражениями

$$H_x = H_0 \sin(\pi x/a) e^{ikz-i\omega t}, \quad (57)$$

$$H_z = H_0 (\lambda_g/2a) \cos(\pi x/a) e^{ikz-i\omega t}, \quad (58)$$

$$E_y = -Z_{TE} H_0 \sin(\pi x/a) e^{ikz-i\omega t}, \quad (59)$$

где  $z$  — направление распространения,  $\lambda_c = 2a$  и  $Z_{TE}$  — характеристический импеданс этой моды:

$$Z_{TE} = (\mu/\epsilon)^{1/2} \frac{\lambda_g}{\lambda}, \quad (60)$$

который равен отношению  $E_y/H_x$  поперечного электрического поля к поперечному магнитному полю. Этот характеристический импеданс больше характеристического импеданса  $Z_0$  неограниченной среды для поперечных электромагнитных волн,

$$Z_0 = (\mu/\epsilon)^{1/2}, \quad (61)$$

и, как правило, мы имеем

$$Z_{TM} < Z_0 < Z_{TE}. \quad (62)$$

Волна распространяется со скоростью

$$v_g = (\mu\epsilon)^{-1/2} \frac{\lambda}{\lambda_g}, \quad (63)$$

которая меньше, чем скорость  $v = (\mu\epsilon)^{-1/2}$  ТЕМ-волны в неограниченной среде, где  $\mu$  и  $\epsilon$  — проницаемости среды, заполняющей волновод. Таким образом, ТЕ- и ТМ-волны распространяются медленнее, чем ТЕМ-волны.

Волновод, действующий на частоте микроволнового диапазона  $10^{10}$  Гц, имеет диаметр около 2 см. Световоды работают аналогично, но их диаметры обычно значительно превышают длины волн распространяющегося по ним света,  $\lambda_g \ll 2a$ , так что волна относится по существу к ТЕМ-типу.

## 9. МОДУЛИРОВАННЫЕ ВОЛНЫ

До сих пор мы рассматривали простые синусоидальные волны. При передаче амплитудно-модулированных радиосигналов синусоидальные волны с высокой несущей частотой  $\omega$  модулируются по амплитуде гармоническим сигналом, имеющим более низкую частоту  $\omega_m \ll \omega$ , называемую частотой модуляции. Рассмотрим высокочастотную несущую волну с амплитудой  $E_0$ , которая модулируется по амплитуде волной, налагаемой на несущую и имеющей амплитуду  $E_m$ . Амплитуда модулированной волны  $E(t)$  изменяется во времени в соответствии с выражением

$$E(t) = (E_0 + E_m \sin \omega_m t) \sin \omega t. \quad (64)$$

Используя тригонометрическое тождество

$$\cos(\omega t \mp \omega_m t) = \cos \omega t \cos \omega_m t \pm \sin \omega t \sin \omega_m t, \quad (65)$$

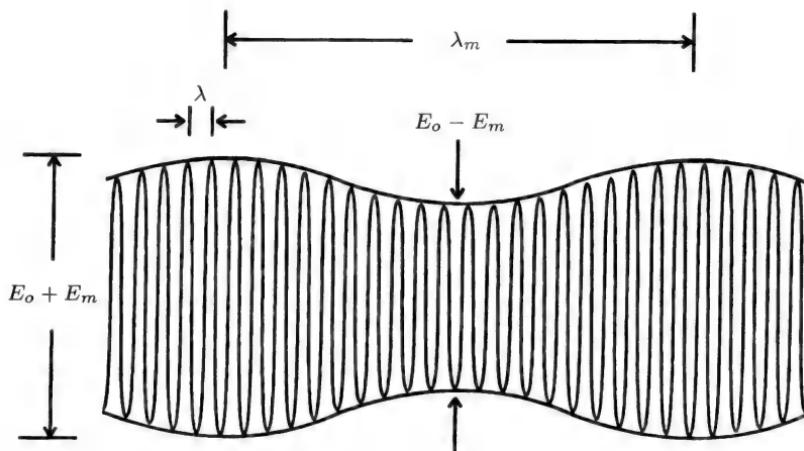


Рис. 13.5. Амплитудно-модулированная волна. Показана быстро осциллирующая несущая на частоте  $\omega$  внутри медленно осциллирующей огибающей с частотой модуляции  $\omega_m$ . Показаны минимальная и максимальная амплитуды, а также длины несущей и модулирующей волн, соответствен-но  $\lambda = 2\pi c/\omega$  и  $\lambda_m = 2\pi c/\omega_m$ .

выражение (64) можно записать в виде

$$E(t) = E_0 \sin \omega t + \frac{1}{2} E_m \cos(\omega - \omega_m)t - \frac{1}{2} E_m \cos(\omega + \omega_m)t. \quad (66)$$

Таким образом, результирующий сигнал состоит из трех частотных компонент: на несущей частоте  $\omega$  и на сумме и разности боковых частот  $\omega \pm \omega_m$ . Общий сигнал имеет следующие минимальную и максимальную амплитуды:

$$\begin{aligned} E_{\min} &= E_0 - E_m, \\ E_{\max} &= E_0 + E_m, \end{aligned} \quad (67)$$

что показано на рис. 13.5, причем глубина модуляции  $m$  в процентах дается выражением

$$m(\%) = 100 E_m / E_0. \quad (68)$$

На рисунке указаны также длины волн  $\lambda = c/\omega$  и  $\lambda_m = c/\omega_m$  соответственно несущего сигнала и сигнала модуляции.

Другой вид модуляции, а именно частотная модуляция, применяемая для ЧМ радио- и телевизионных передач, из-за ограниченных рамок книги нами рассматриваться не будет.

## 10. СОЛИТОНЫ

Уединенная волна, или солитон, — это волна, которая имеет локализованную структуру и распространяется без изменения структуры. Солитон впервые наблюдал Джон Скотт Рассел в 1834 г. как острое и закругленное возвышение на поверхности воды с высотой пика  $h$ , которое движется в канале глубиной  $d$  со скоростью

$$v = [g(h + d)]^{1/2}, \quad (69)$$

составляющей в среднем около 14 км/ч. Первые наблюдения Рассел выполнял, наблюдая за гребнем волн. Он обнаружил также, что более высокая и, следовательно, движущаяся с более высокой скоростью [в соответствии с выражением (69)] уединенная волна может столкнуться с более медленно движущейся волной и пройти сквозь нее.

Профиль солитона  $\psi(x, t)$  в случае  $h \ll d$  дается выражением

$$\psi(x, t) = h \operatorname{sch}^2[(x - vt)/w], \quad (70)$$

где параметр ширины  $w$  равен

$$w = 2d[(h + d)/3h]^{1/2} \quad (71)$$

и при  $h \ll d$  имеет приближенное значение

$$w \sim 2(d^3/3h)^{1/2}. \quad (72)$$

На рис. 13.6 представлены профили солитонов для трех значений высоты и ширины. В 1895 г. Кортевег и де Фрис показали, что

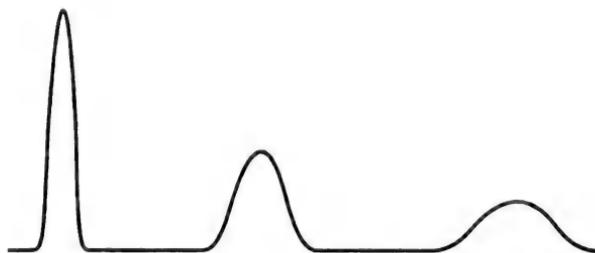


Рис. 13.6. Три солитона с различными амплитудами и ширинами. (Из книги: *Dodd et all., Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Academic Press, New York, 1982, p. 5.)

уединенные волны Рассела можно описать уравнением, названным их именами:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (g/h)^{1/2} \left[ \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} + \left(\frac{3}{2}\right) \psi \frac{\partial \psi}{\partial x} - \left(\frac{1}{2}\right) \sigma \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right], \quad (73)$$

где

$$\sigma = \frac{1}{3} h^3 - hT/g\rho, \quad (74)$$

$T$  — поверхностное натяжение,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\rho$  — плотность жидкости, а  $\varepsilon$  — произвольный параметр. Во многих случаях членом с поверхностным натяжением можно пренебречь. Одним из ранних уравнений квантовой механики было уравнение Клейна—Гордона, которое в одномерном случае записывается следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x^2} \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (mc/\hbar)^2 \psi, \quad (75)$$

где  $\hbar/m_e c = \lambda_c/2\pi$ , причем  $\lambda_c = 2,426 \cdot 10^{-12}$  м — комптоновская длина волны электрона. Это уравнение имеет решения в виде гармонической волны  $e^{ikx-i\omega t}$ , которая приводит к следующему дисперсионному соотношению между  $\omega$  и  $k$ :

$$(\omega/c)^2 = k^2 + (2\pi/\lambda_c)^2. \quad (76)$$

Как фазовая, так и групповая скорости

$$v_0 = \omega/k, \quad v_q = d\omega/dk \quad (77)$$

зависят от  $k$ , поэтому волна, характеризуемая некоторой областью значений  $k$ , при распространении будет расплываться, или диспергировать.

Нелинейное уравнение Клейна—Гордона

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (2\pi/\lambda_c)^2 \sin \psi, \quad (78)$$

называемое уравнением синус-Гордона, имеет решение в виде солитонов, т. е. в виде уединенных волн, которые могут распространяться на большие расстояния, прежде чем они начнут расплываться. Существуют решения, называемые кинковыми, или частицеподобными, которые описывают скручивание переменной  $\psi(x, t)$ , и антикинковые решения с вращением в противоположном направлении.

# ОПТИКА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Вначале кратко рассмотрим геометрическую оптику, линзы и зеркала, затем более подробно остановимся на физической оптике, включающей поляризацию, интерференцию и дифракцию. Мы уже упоминали некоторые стандартные оптические проблемы в других главах, например в гл. 13, посвященной волновым процессам.

### 2. ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

Показатель преломления большинства материалов  $n = (\epsilon'/\epsilon_0)^{1/2}$  принимает наибольшее значение в области очень низких частот электромагнитного излучения и уменьшается до  $n \approx 1$  в рентгеновской области. В данном разделе будет рассмотрена вещественная часть  $\epsilon'$  комплексной диэлектрической проницаемости  $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ . В гл. 13 мы видели, что в значительной части частотного диапазона показатель преломления в действительности увеличивается с ростом частоты, и основное уменьшение  $n$  происходит вблизи резонансов, как показано на рис. 13.3. У оптических стекол видимая область спектра обычно расположена до резонанса, т. е. там, где  $n$  увеличивается с частотой. При этом производная  $dn/d\omega$  положительна и это отвечает нормальной дисперсии; если  $dn/d\omega$  отрицательна, то дисперсия называется аномальной. Поэтому у синей границы видимого спектра  $n$  больше, чем у красной границы, и призма отклоняет синие лучи сильнее, чем красные. Цветные стекла или полупрозрачные материалы характеризуются полосами поглощения в видимой области спектра, которые соответствуют пикам на графике  $\epsilon''(\omega)$ .

У некоторых оптических систем удается компенсировать дисперсию. Важную роль играет комбинация призм из стекол сорта

крон и флинт, которая разлагает свет на отдельные цвета, не отклоняя световой пучок, и ахроматическая призма, в которой отклонение светового пучка не сопровождается дисперсией, т. е. происходит без разложения на цвета.

### 3. ЛИНЗЫ

Тонкая собирающая (положительная) линза фокусирует свет, падающий параллельно ее оси, в фокальной точке  $f$ , как показано на рис. 14.1. Формула линзы

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{s'} = \frac{1}{f} \quad (1)$$

позволяет вычислить расстояние до изображения  $s'$  при данном расстоянии до предмета  $s$ . Если и  $s$ , и  $s'$  больше  $f$ , то изображение является действительным (т. е. расстояние  $s'$  положительно) и перевернутым, как показано на рис. 14.1, причем линейное (поперечное) увеличение  $m$  дается выражением

$$m = -s'/s, \quad (2)$$

где отрицательный знак указывает на то, что изображение перевернуто. Если расстояние до предмета меньше фокусного расстояния ( $s < f$ ), то величина  $s'$  отрицательна и превышает фокусное расстояние, так что изображение оказывается мнимым, прямым и увеличенным (рис. 14.2).

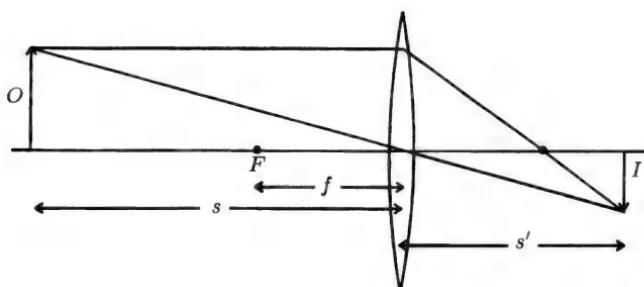


Рис. 14.1. Тонкая собирающая линза. Изображение  $I$  предмета  $O$ , расположенного на расстоянии  $s$  перед линзой (слева), является действительным, перевернутым и располагается справа от линзы на расстоянии  $s'$  от нее. Заметим, что в этом случае как  $s$ , так и  $s'$  больше фокусного расстояния  $f$ .

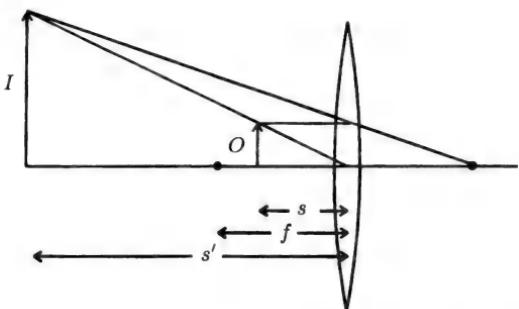


Рис. 14.2. Тонкая собирающая линза из рис. 14.1 формирует изображение  $I$  предмета  $O$  (расположенного перед линзой в пределах фокусного расстояния,  $s < f$ ), которое является мнимым, прямым, увеличенным и расположено на расстоянии  $s'$  слева от линзы.

У рассеивающей линзы фокусное расстояние отрицательно, а поскольку расстояние до предмета положительно и справедлива формула линзы, то расстояние  $s'$  должно быть отрицательным и меньше  $s$ . Отрицательное значение  $s'$  означает, что изображение мнимое, а из формулы (2) имеем  $0 < m < 1$ , и, следовательно, изображение вертикально, а увеличение меньше 1 (рис. 14.3).

Поскольку в формулу линзы входят обратные величины, оптики считают удобным измерять расстояния в обратных метрах, т. е. в диоптриях. Линзы характеризуют оптической силой, выраженной

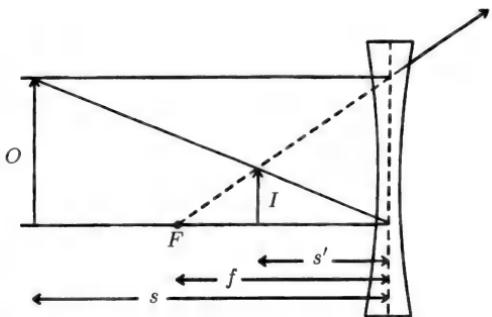


Рис. 14.3. Тонкая рассеивающая линза формирует изображение  $I$  предмета  $O$  (расположенного слева от линзы на расстоянии  $s$  от нее), которое является мнимым, прямым и расположено на расстоянии  $s'$  слева (увеличение  $m < 1$ ).

в диоптриях, т. е. величиной, обратной фокусному расстоянию в метрах.

Для тонких линз фокусное расстояние определяется формулой

$$\frac{1}{f} = (n - 1) \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right); \quad (3)$$

здесь  $r_1$  — радиус кривизны первой поверхности линзы по отношению к падающему лучу света; выпуклым поверхностям соответствуют положительные значения  $r_j$ , а вогнутым — отрицательные  $r_j$ . У типичной собирающей линзы величина  $r_1$  положительна,  $r_2$  — отрицательна. У плоских поверхностей  $r_j$  равен бесконечности, а  $1/r_j = 0$ .

В случае комбинации тонких линз две линзы располагаются друг за другом. Формула линзы (1) применяется последовательно к каждой линзе, причем изображение, создаваемое первой линзой, выполняет роль предмета для второй.

Рассмотрим предмет, находящийся в среде с показателем преломления  $n$  и расположенный на расстоянии  $s$  от выпуклой поверхности с радиусом кривизны  $r$ , за которой показатель преломления среды  $n'$ . Изображение формируется на расстоянии  $s'$  от поверхности, причем

$$\frac{n}{s} + \frac{n'}{s'} = \frac{n' - n}{r}. \quad (4)$$

Таким образом, если вторая среда оптически более плотная ( $n' > n$ ), то в ней за выпуклой поверхностью образуется действительное изображение.

#### 4. ЗЕРКАЛА

Фокусное расстояние  $f$  сферического зеркала радиусом  $r$

$$f = -\frac{1}{2}r \quad (5)$$

и формула зеркала имеет тот же вид, что и формула (1) линзы:

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{s'} = \frac{1}{f}. \quad (6)$$

Расстояния до предмета  $s$  и до изображения  $s'$  положительны, если предмет и изображение расположены слева от зеркала, что соответствует действительному изображению. Принято считать, что зеркало, повернутое своей вогнутой стороной к предмету, имеет положительное фокусное расстояние и отрицательный радиус кривизны,

и в случае  $s > f$  образуется действительное перевернутое изображение.

Такое зеркало фокусирует падающий на него параллельный пучок света ( $s = \infty$ ) на расстоянии  $s' = f$  перед зеркалом. У выпуклого зеркала фокусное расстояние отрицательно, и в нем всегда образуется мнимое прямое изображение уменьшенных размеров. Увеличение  $m$  обоих зеркал дается выражением

$$m = -s'/s. \quad (7)$$

Фокусное расстояние плоского зеркала равно бесконечности, и из формулы (6) следует, что  $s = -s'$ , т. е. изображение мнимое и того же размера, что и предмет.

## 5. ПОЛЯРИЗАЦИЯ

После краткого обзора геометрической оптики рассмотрим некоторые разделы физической оптики. Оптические эксперименты, как правило, проводятся с узкими пучками плоских волн, у которых вектор  $\mathbf{E}$ ,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varphi)] \quad (8)$$

обладает по возможности постоянной поляризацией, монохроматичностью, амплитудой и фазой  $\varphi$ . С разработкой более усовершенствованных лазеров все эти характеристики значительно улучшились в последние годы.

Поляризация электромагнитной волны, распространяющейся в направлении  $z$ , зависит от относительных амплитуд и фаз составляющих  $E_x$  и  $E_y$ , соответственно  $A$  и  $B$ , ее электрического поля  $\mathbf{E}$ :

$$\mathbf{E} = [A \exp(i\varphi_x) \hat{\mathbf{i}} + B \exp(i\varphi_y) \hat{\mathbf{j}}] e^{i(kz) - \omega t}. \quad (9)$$

Обычно бывает удобно положить фазу  $x$ -составляющей  $A$  равной нулю, а  $y$ -составляющую  $B$  записать в виде  $e^{i\varphi}$ , где  $\varphi = \varphi_y - \varphi_x$  — разность фаз между  $x$ - и  $y$ -составляющими вектора  $\mathbf{E}$ . В обозначении Джонса

$$E_0 = \begin{vmatrix} A \\ B e^{i\varphi} \end{vmatrix}, \quad (10)$$

причем амплитуды нормированы на единицу:

$$A^2 + B^2 = 1. \quad (11)$$

Для случая линейной поляризации  $\varphi = 0$  направление вектора  $\mathbf{E}$  задается углом  $\theta$ :

$$\operatorname{tg} \theta = B/A. \quad (12)$$

В случае круговой поляризации  $A = B = \sqrt{2}$ , фаза  $\varphi = \pm\pi/2$ ,  $e^{i\pi/2} = i$ , и мы имеем

$$E_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ i \end{vmatrix}, \quad E_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} i \\ 1 \end{vmatrix}. \quad (13)$$

левая круговая  
поляризация  
(против часовой  
стрелки)      правая круговая  
поляризация  
(по часовой  
стрелке)

Для случая эллиптической поляризации соответственно имеем

$$E_0 = \begin{vmatrix} A \\ iB \end{vmatrix}, \quad E_0 = \begin{vmatrix} iA \\ B \end{vmatrix}. \quad (14)$$

(против часовой  
стрелки)      (по часовой  
стрелке)

Примеры линейной и круговой поляризаций представлены на рис. 14.4.

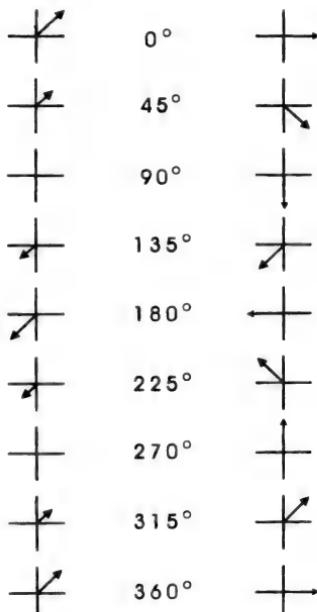


Рис. 14.4. Изменение величины и направления электрического вектора  $E$  в течение периода для случаев линейной (слева) и круговой (справа) поляризаций.

В гл. 13 мы видели, что если неполяризованный свет падает на диэлектрическую среду под углом, равным углу Брюстера  $i_B$ , определяемому как

$$\operatorname{tg} i_B = n, \quad (15)$$

то отраженный пучок обладает 100%-ной линейной поляризацией перпендикулярно плоскости падения. Это удобный способ получения линейно поляризованного света.

## 6. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ И ДИФРАКЦИЯ

Явления интерференции и дифракции иллюстрируют волновую природу света. Обсудим каждое из них в отдельности. Два пучка света, пересекая друг друга, выходят из области перекрытия без каких-либо изменений. Однако в области их перекрытия амплитуды электрического и магнитного полей представляют собой суперпозиции полей двух пучков; это явление называется интерференцией. Когда световая волна проходит через отверстие или вблизи края препятствия, она претерпевает некоторое изменение и это изменение влияет на ее распространение в соседних областях пространства. В этом случае говорят, что волна испытывает дифракцию.

Чаще всего проводятся два типа дифракционных экспериментов. В дифракции Фраунгофера источник света и экран, на котором наблюдается дифракционная картина, располагаются на больших расстояниях от области дифракции. Для получения параллельного пучка и его фокусировки на экране могут использоваться линзы. При дифракции Френеля либо источник света, либо экран, либо и то и другое находятся на небольших расстояниях от апертуры пучка, так что в линзах нет необходимости. Дифракцию Френеля обычно проще наблюдать, а дифракцию Фраунгофера легче интерпретировать. К последней мы вернемся позже при рассмотрении дифракции на широкой щели. Механизм интерференции и дифракции можно проанализировать на основе принципа Гюйгенса, согласно которому каждую точку волнового фронта можно рассматривать как источник новых элементарных волн. Последующие положения волнового фронта можно начертить в виде огибающей небольших полусфер или в двумерном случае небольших полукружностей, радиусы которых располагаются вдоль фронта и пропорциональны локальной скорости света  $v = c/n$  в данной

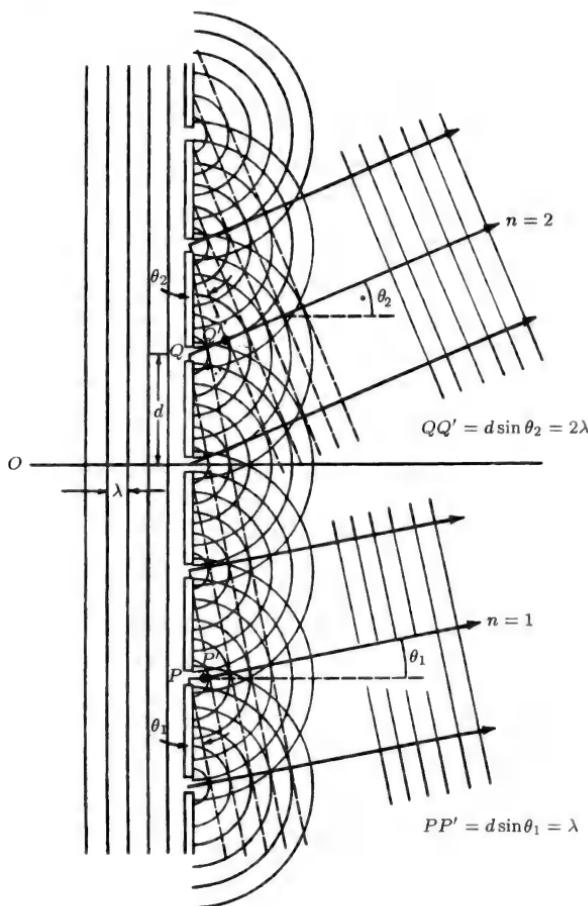


Рис. 14.5. Пример построения волновых фронтов Гюйгенса при дифракции на многих щелях. Случаи  $d \sin \theta = n\lambda$  показаны для  $n = 1$  и  $n = 2$ . (Из книги: *J. P. McKelvey, H. Grotz, Physics for Science and Engineering*, Harper and Row, New York, 1978, Fig. 26. 34.)

точке. Если фронт плоской волны падает на вторую среду под некоторым углом, полусфера Гюйгенса будут иметь разные радиусы в обеих средах, чем и объясняется изгиб волнового фронта на границе раздела. Излучение волн Гюйгенса служит причиной, по которой волна попадает в область тени от препятствия и отклоняется на его краях. Такова природа ди-

фракции. На рис. 14.5 приведены два примера построения волн Гюйгенса при дифракции на большом числе щелей.

## 7. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ

Примером возникновения интерференции может служить отражение света от верхней и нижней поверхностей стеклянной пластинки, при котором происходит наложение обоих отраженных пучков света. Мы предполагаем, что свет монохроматичен и падает на пластинку под прямым углом. Интерференция возникает благодаря разности фаз, приобретаемой одним из пучков при прохождении пластиинки. Кроме того, необходимо учитывать дополнительный сдвиг фазы на  $\pi$ , который возникает, когда волна, распространяющаяся в среде с показателем преломления  $n_1$ , отражается от среды с показателем преломления  $n_2 > n_1$  и претерпевает изменение знака в соответствии с выражением [см. формулу (22), гл. 13]:

$$E_{\text{отр}} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} E_{\text{пад.}} \quad (16)$$

Условие конструктивной интерференции (максимума интенсивности) имеет вид

$$2nd = \left( m + \frac{1}{2} \right) \lambda, \quad (17)$$

где  $2d$  — длина полного пути света (туда и обратно) в стеклянной пластинке,  $\lambda/n$  — длина световой волны в стекле и множитель  $\frac{1}{2}$  учитывает изменение фазы согласно (16). Примером такой интерференции служат кольца Ньютона.

В интерферометре Майкельсона световой пучок расщепляется на два, каждый из которых затем отражается зеркалом и после прохождения ими соизмеримого расстояния вновь объединяются. Небольшой регулировкой положения зеркал удается изменять относительные длины путей двух пучков, в результате чего интерференционные полосы оказываются либо светлыми, либо темными.

## 8. ЯВЛЕНИЯ, ПРОИСХОДЯЩИЕ НА ОДНОЙ, ДВУХ И БОЛЬШОМ ЧИСЛЕ ЩЕЛЕЙ

Рассмотрим плоскую световую волну, падающую под прямым углом на непрозрачный экран, в котором имеются две щели  $S_1$  и  $S_2$  шириной  $a$ , расположенные на расстоянии  $d$  друг от друга. Каждая щель

служит источником света и оба испускаемых пучка могут интерферировать друг с другом. Кроме того, при прохождении каждой щели падающий пучок будет дифрагировать. Вследствие этих двух явлений на экране, удаленном от щелей на расстояние  $D$ , возникает картина из светлых и темных полос. Чтобы объяснить наблюдаемую картину, рассмотрим сначала случай очень узких щелей, когда  $a \ll d$ , так что дифракцией на отдельных щелях можно пренебречь. Затем исследуем дифракцию на одной щели и, наконец, опишем общую картину, возникающую с учетом обоих факторов.

На рис. 14.6 схематически показан эксперимент Юнга, в котором пучки от двух щелей приходят в точку  $P$ , расположенную на экране на расстоянии  $x$  от средней точки  $P_0$ . Из рисунка видно, что разность хода от двух щелей до точки  $P$  удовлетворяет выражению

$$\sin \theta = m\lambda/d, \quad (18)$$

а расстояние  $x$  вдоль экрана определяется как

$$\operatorname{tg} \theta = x/D. \quad (19)$$

Поскольку в этом эксперименте  $x \ll D$ , то угол  $\theta$  мал и, следовательно,  $\sin \theta$  можно приравнять  $\operatorname{tg} \theta$  и тогда

$$x = m\lambda D/d \quad (\text{максимум}), \quad (20)$$

где  $m$  — целое число. Это условие конструктивной интерференции. Светлые полосы означают, что поля  $\mathbf{E}$  от двух щелей находятся в

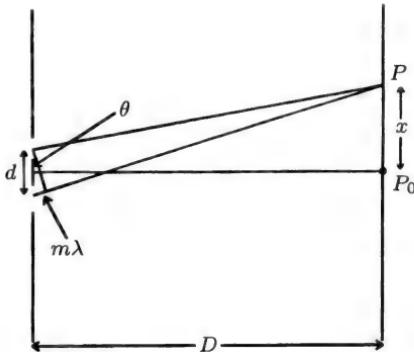


Рис. 14.6. Схематическое изображение эксперимента Юнга. Показаны две щели на расстоянии  $d$  в непрозрачном экране слева. Пучки света от каждой щели встречаются в точке  $P$  на экране, расположенном на расстоянии  $D$  справа.

фазе и складываются. Аналогичное рассуждение приводит к выражению

$$x = \left(m + \frac{1}{2}\right) \lambda D/d \quad (\text{минимум}), \quad (21)$$

которое является условием деструктивной интерференции и возникновения темных полос.

После того как мы рассмотрим интерференционные эффекты, возникающие при прохождении света через две узкие щели, уместно обратиться к дифракции на одной щели. Рассмотрим щель, достаточно широкую для того, чтобы свет от различных ее участков мог интерферировать и создавать на экране картину максимумов и минимумов. Используется параллельный пучок падающего света, как и в случае двух щелей, и экран удален от щели на большое расстояние, так что выполняются условия дифракции Фраунгофера. Если угол дифракции  $\theta$  таков, что разность хода от одного и другого концов щели до точки наблюдения  $P$  составляет одну длину волны, то на экране возникнет равномерное распределение всех фаз, которые в половине случаев соответствуют положительной ориентации вектора  $\mathbf{E}$ , а в остальном — отрицательной ориентации вектора  $\mathbf{E}$ , что приводит к деструктивной интерференции и минимуму освещенности. Таким образом, условие минимума в дифракции Фраунгофера на широкой щели совпадает с условием максимума в случае интерференции на двух щелях, и мы имеем для  $m$ -го минимума

$$x = m\lambda D/a \quad (\text{минимум}). \quad (22)$$

Максимумы расположены при

$$x = \left(m + \frac{1}{2}\right) \lambda D/a \quad (\text{максимум}), \quad (23)$$

где  $m$  — целое число. Интенсивность  $I$  в максимуме зависит от величины  $m$  (см. любой учебник по оптике)

$$I = I_0 \left( \frac{\sin \beta}{\beta} \right)^2, \quad (24)$$

причем  $\beta$  дается выражением

$$\beta = \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} = \quad (25)$$

$$= \left(m + \frac{1}{2}\right) \pi \quad (\text{максимум}); \quad (26)$$

здесь использованы выражения (23) и приближение  $\sin \theta \approx \tan \theta \approx x/D$ , как в случае интерференции на двойной щели. При  $\theta = \beta = 0$

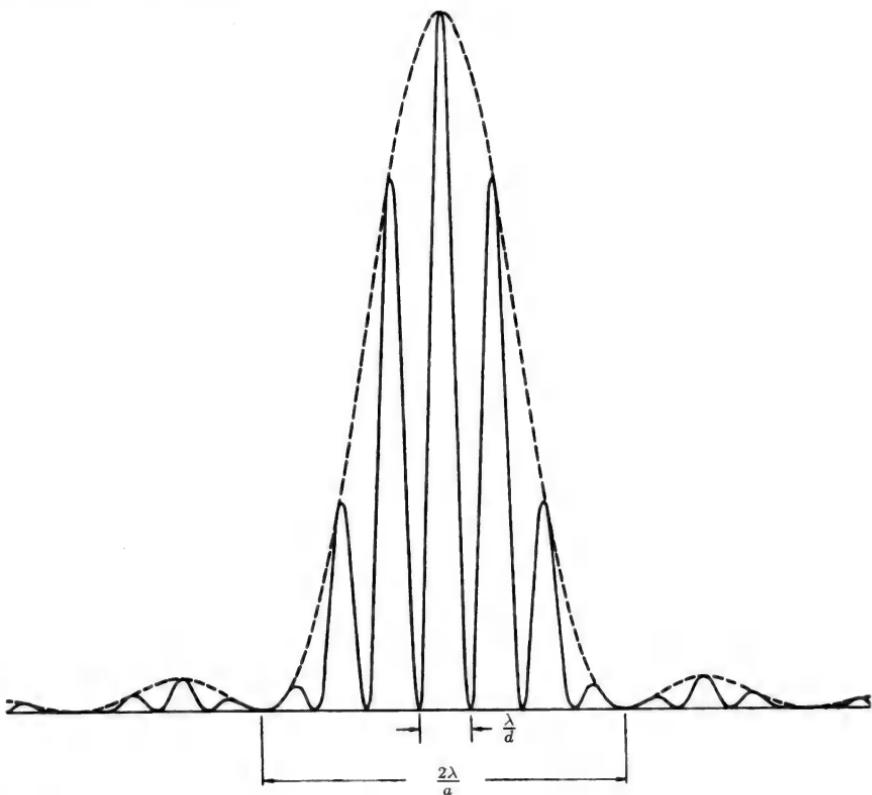


Рис. 14.7. Картина дифракции Фраунгофера от двух щелей шириной  $a$  при расстоянии между ними  $d = 3,5a$ . Распределение интенсивности в случае двойной щели с относительным расстоянием  $\lambda/d$  определяется огибающей, которая отвечает относительному расстоянию между полосами  $\lambda/a$  при дифракции на одной щели. (Из книги: *W. C. Elmore, M. A. Heald, Physics of Waves*, McGraw-Hill, New York, 1969, Fig. 10.6.2, p. 367.)

расположено центральное яркое пятно интенсивностью  $I_0$ , а интенсивности последующих максимумов даются выражением

$$I_m = \frac{I_0}{\left(m + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2}, \quad (27)$$

которое описывает огибающую на рис. 14.7.

Из выражений (20) и (23) следует, что для случаев двух щелей и одной широкой щели расстояния между полосами на экране равны

соответственно

$$\Delta x = \lambda D/d \quad \text{двойная щель,} \quad (28)$$

$$\Delta x = \lambda D/a \quad \text{одна широкая щель.} \quad (29)$$

Картина полос в случае двух широких щелей представляет собой сочетание двух дифракционных картин, причем распределение интенсивности, определяемое выражением (27), представляет собой огибающую интерференционной картины от двух более тесно расположенных щелей, поскольку по определению  $a < d$ . На рис. 14.7 представлен пример такой комбинированной дифракционной картины для случая, когда расстояние между щелями  $d = 3,5a$ .

При большом числе находящихся на одинаковом расстоянии друг от друга щелей получается дифракционная решетка. Чем больше число щелей, тем уже полосы. В случае нормального падения света на решетку ( $i = \pi/2$ ) главный максимум отвечает углу дифракции  $\theta$ , определяемому выражением

$$d \sin \theta = m\lambda. \quad (30)$$

При падении света под любым другим углом  $i$  уравнение дифракционной решетки записывается следующим образом:

$$d(\sin \theta + \sin i) = m\lambda. \quad (31)$$

В случае пропускающей дифракционной решетки штрихи наносятся на плоскую стеклянную поверхность, а штрихи отражательной дифракционной решетки — на полированное зеркало.

# ГЛАВА 15

---

## ПРОЦЕССЫ ИЗЛУЧЕНИЯ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В начале этой главы изложен общий подход к процессам излучения распределенных зарядов и токов, а затем рассмотрены некоторые примеры излучения движущихся зарядов. В конце главы обсуждаются излучение зарядов, ускоренных до релятивистских энергий, излучение Черенкова и переходное излучение.

### 2. ИЗЛУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ЗАРЯДОВ И ТОКОВ

Рассмотрим нерелятивистскую задачу об излучении гармонически колеблющихся локализованных зарядов и токов

$$\rho(\mathbf{r}', t) = \rho(\mathbf{r}')e^{-i\omega t}, \quad (1)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}', t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}')e^{-i\omega t}. \quad (2)$$

Такие источники излучения хорошо известны и связаны друг с другом уравнением непрерывности

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (3)$$

которое в нашем случае имеем вид

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = i\omega \rho. \quad (4)$$

Колебания плотности тока служат источником вектор-потенциала

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (5)$$

который путем интегрирования позволяет найти магнитное поле излучения

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (6)$$

Используя уравнение Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -i\omega \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (7)$$

можно найти выражение ротора (6) и (с учетом  $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$ ) получить электрическое поле излучения

$$\mathbf{E} = \frac{ic}{k} \nabla \times \mathbf{B}, \quad (8)$$

где величины  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{E}$ , вычисленные на основе уравнений (5), (6) и (8), относятся к области пространства вне источника, в котором  $\mathbf{J} = 0$ . Таким образом, интеграл (5) по плотности тока позволяет определить электрическое и магнитное поля излучения.

### 3. ЗОНЫ ИЗЛУЧЕНИЯ

Особый интерес представляет случай, когда излучающие токи и заряды локализованы в малой области с характерным размером  $d$ , который значительно меньше длины волны излучения,  $d \ll \lambda$ . Такое ограничение позволяет использовать некоторые приближения, упрощающие вычисление интеграла (5) по распределению источников. Можно выделить три зоны расстояний  $r$  от источника, в каждой из которых можно рассчитать картину полей:

$$d \ll r \ll \lambda \quad \text{ближняя, или статическая зона} \quad (9a)$$

$$d \ll r \approx \lambda \quad \text{промежуточная, или зона индукции} \quad (9b)$$

$$d \ll \lambda \ll r \quad \text{ дальняя, или зона излучения} \quad (9v)$$

Поскольку  $k = 2\pi/\lambda$ , условие (9a) для ближней зоны можно записать в виде  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$  и, следовательно, экспоненциальный член в интеграле (5) положить равным единице. С другой стороны, член  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$  можно разложить в ряд по тессеральным гармоникам методом, описанным в гл. 28, после чего выражение (5) для вектор-потенциала принимает вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum \frac{2\pi}{2\ell + 1} \frac{Z_{\ell M}^{S,C}(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} \int \mathbf{J}(\mathbf{r}') Z_{\ell M}^{S,C}(\theta', \varphi') r'^\ell d^3 r'. \quad (10)$$

Ближнее поле носит статический характер и испытывает гармонические колебания; его принято называть квазистационарным. Наличие члена  $r^{\ell+1}$  в знаменателе приводит к тому, что основную роль играют неисчезающие моменты низшего порядка.

В промежуточной зоне, или зоне индукции, где  $\lambda \sim r$  и  $kr \sim 2\pi$ , в разложении должны присутствовать все степени  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ , в результате чего задача значительно осложняется. В этом случае можно

использовать мультипольное разложение, однако мы не будем рассматривать решение для этой зоны, поскольку она не представляет большого практического интереса.

Зона излучения является наиболее важной. В этой зоне  $\lambda \ll r$  (и, следовательно,  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \gg 1$ ), что соответствует быстрым колебаниям показателя экспоненты. Поскольку в этой зоне  $r' \ll r$ , можно положить  $\mathbf{r} = \hat{\mathbf{n}}r$  и использовать в показателе экспоненты приближение

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}', \quad (11)$$

позволяющее вынести член  $e^{ikr}$  из-под знака интеграла, а также заменить  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  в знаменателе на  $r$ . Поскольку  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' \ll 1$ , экспоненту  $e^{ik\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}'}$  можно разложить в быстро сходящийся степенной ряд и в результате получить окончательное выражение

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \sum \frac{(-ik)^n}{n!} \int \mathbf{J}(\mathbf{r}') (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}')^n d^3 r', \quad (12)$$

демонстрирующее, что излучение обусловлено главным образом первым отличным от нуля членом степенного разложения.

#### 4. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДИПОЛЯ

Для излучения электрического диполя  $n = 0$  и мы можем, используя уравнение (4), проинтегрировать уравнение (12) по частям и вычислить вектор-потенциал  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  в виде интеграла от плотности дипольного момента  $\rho(x', y', z') \mathbf{r}'$ , что дает

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} ik c p \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (13)$$

Подставляя результат в (6) и (8), получим поля излучения в явном виде:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} k^2 c (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{p}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (14)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} k^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{p}) \times \hat{\mathbf{n}} \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (15)$$

Если ввести сферическую систему координат с осью  $z$ , направленной вдоль дипольного момента  $\mathbf{p}$ , то полученные выражения приобретают вид (рис. 15.1)

$$\mathbf{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi} k^2 c p \sin \theta \frac{e^{ikr}}{r} \hat{\phi}_0, \quad (16)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} k^2 p \sin \theta \frac{e^{ikr}}{r} \hat{\theta}_0. \quad (17)$$

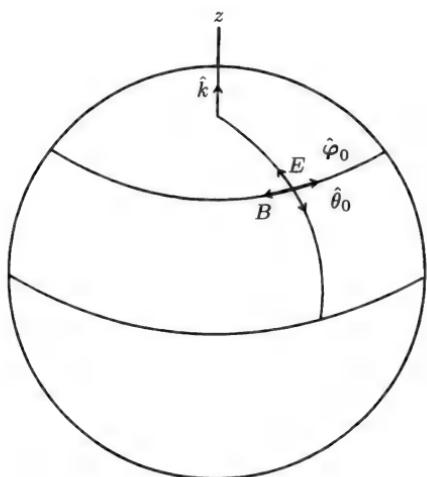


Рис. 15.1. Поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  излучения осциллирующего электрического диполя (расположен в центре и вытянут вдоль оси  $z$ ) в сферических координатах  $\theta$  и  $\varphi$  (приведены соответствующие единичные векторы).

На рис. 15.1 показано также направление единичных векторов  $\hat{\theta}_0$  и  $\hat{\varphi}_0$ . Легко показать, что вектор Пойнтинга

$$\mathbf{E} \times \mathbf{H} = (\text{const}) \frac{p^2 \sin^2 \theta}{r^2} \hat{\mathbf{n}} \quad (18)$$

в зоне излучения спадает с расстоянием пропорционально  $1/r^2$ , аксиально симметричен (т. е. не зависит от  $\varphi$ ), зависит от угла как  $\sin^2 \theta$  и максимальен в плоскости  $(x, y)$ , перпендикулярной оси диполя.

В зоне излучения магнитный дипольный момент  $\mu$ , определяемый выражением (31) гл. 11, равен

$$\mu = \frac{1}{2} \int \mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') d^3 r', \quad (19)$$

а соответствующий вектор-потенциал

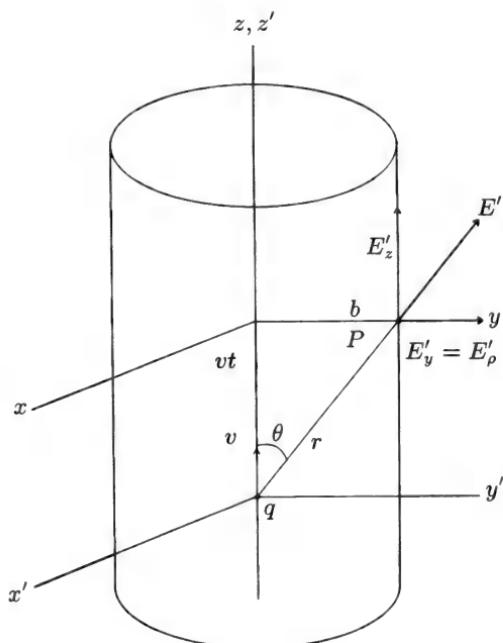
$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} (ik\hat{\mathbf{n}} \times \mu) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (20)$$

совпадает по виду с магнитным полем  $\mathbf{B}$  электрического диполя (14) с заменой  $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{p}$  на  $\hat{\mathbf{n}} \times \mu$ . Поэтому магнитное поле излучения  $\mathbf{B}$  магнитного диполя совпадает по виду с электрическим полем излучения  $\mathbf{E}$  электрического диполя.

## 5. ИЗЛУЧЕНИЕ РАВНОМЕРНО ДВИЖУЩЕГОСЯ ЗАРЯДА

Электрическое и магнитное поля равномерно движущегося заряда просто увлекаются им вдоль траектории движения, тогда как при ускоренном движении заряда возникает излучение. В этом разделе мы рассмотрим поля, связанные с равномерно движущимся зарядом, а в следующих — излучение ускоренных зарядов.

Пусть заряд  $q$  движется по прямой в направлении  $z, z'$ , как показано на рис. 15.2. Наблюдателю в точке  $P$ , находящейся на расстоянии  $b$  от оси  $z$  в направлении  $y$ , заряд виден под углом  $\theta$  к оси  $z$ . Для наблюдателя движение начинается при  $z = -\infty$  и  $\theta = 0$  и заканчивается при  $z = +\infty$ ,  $\theta = \pi$ . В качестве  $t = 0$  можно принять момент максимального сближения заряда с наблюдателем, что соответствует углу  $\theta = \pi/2$ . В системе покоя заряда в любой момент времени в



**Рис. 15.2.** Система координат, используемая при расчете электрического и магнитного полей в точке  $P$  при равномерном движении заряда  $q$  со скоростью  $v$  в направлении  $z$ . Приведены декартовы координаты в лабораторной системе  $(x, y, z)$  и в системе покоя частицы  $(x', y', z')$ .

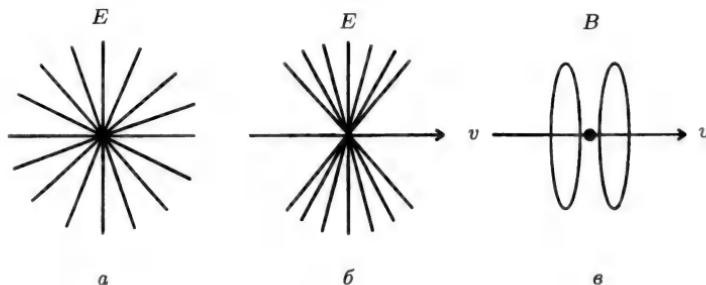


Рис. 15.3. Конфигурация электрического поля вокруг неподвижного электрического заряда (a) и заряда, движущегося с релятивистской скоростью (b). Магнитное поле (c) соответствует движущемуся заряду.

точке  $P$  существует только электрическое радиально направленное поле с составляющими (см. J. P. Jackson. Classical Electrodynamics, Wiley, New York, 1975, p. 553):

$$E'_z = E' \cos \theta = \frac{-qvt'}{4\pi\epsilon_0 r'^3} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma vt}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}}, \quad (21)$$

$$E'_\rho = E'_y = E' \sin \theta = \frac{qb}{4\pi\epsilon_0 r'^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qb}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} \quad (22)$$

и  $E'_\varphi = 0$ , а магнитное поле в системе покоя заряда отсутствует. При преобразовании поля заряда в систему наблюдателя координат возникают три ненулевые составляющие:

$$E_z = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma vt}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}}, \quad (23)$$

$$E_\rho = E_y = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma b}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}}, \quad (24)$$

$$B_\varphi = B_x = \beta E_y / c. \quad (25)$$

При этом линии напряженности электрического поля концентрируются вблизи направления, перпендикулярного направлению движения, а линии напряженности магнитного поля  $B$  образуют замкнутые окружности вокруг траектории заряда (рис. 15.3).

## 6. ИЗЛУЧЕНИЕ УСКОРЕННОГО ЗАРЯДА

Использование теории относительности для расчета излучения быстро движущегося заряда приводит к модификации нерелятивистских потенциалов при замене покоящихся зарядов движущимися

зарядами  $e\mathbf{v}$ . Кроме того, необходимо учитывать, что потенциалы в точке пространства  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  соответствуют положению заряда в более ранний момент времени  $t'$ , т. е. учитывать время запаздывания

$$t - t' = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c. \quad (26)$$

Эти преобразования приводят к выражениям (см. *J. P. Jackson, Classical Electrodynamics*, 1975, ch. 14)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{e\beta}{(1 - \beta \cdot \hat{\mathbf{n}})R} \right]_{\text{зап}}, \quad (27)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{e}{(1 - \beta \cdot \hat{\mathbf{n}})R} \right]_{\text{зап}}, \quad (28)$$

где  $R$  — расстояние от наблюдателя до заряда, а  $\hat{\mathbf{n}}$  — единичный вектор в направлении  $\mathbf{R}$ . После довольно сложных вычислений для электрического и магнитного полей получаются выражения

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{2\pi\epsilon_0} \left( \frac{\hat{\mathbf{n}} - \beta}{\gamma^2(1 - \beta \cdot \hat{\mathbf{n}})^3 R^2} \right)_{\text{зап}} + \frac{e}{4\pi_0 c} \left( \frac{\hat{\mathbf{n}} \times \{(\hat{\mathbf{n}} - \beta) \times \dot{\beta}\}}{(1 - \beta \cdot \hat{\mathbf{n}})^3 R} \right)_{\text{зап}}, \quad (29)$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c} [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}]_{\text{зап}}. \quad (30)$$

Первый член в (29), который описывает поле, связанное с движением заряда с постоянной скоростью, спадает с расстоянием пропорционально  $1/R^2$  и не создает излучения; однако второй член (связанный с наличием ускорения) спадает пропорционально  $1/R$ , что характерно для поля излучения.

## 7. ИЗЛУЧЕНИЕ УСКОРЕННОГО ЗАРЯДА В НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ОБЛАСТИ

При ускорении медленно движущегося заряда ( $\beta \ll 1$ ) второй член в правой части формулы (29), описывающий поле излучения, принимает более простой вид

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \approx \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \dot{\beta})}{R}. \quad (31)$$

Абсолютная величина поля при этом равна

$$E(\mathbf{r}, t) \approx \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{\dot{\beta} \sin \theta}{R}, \quad (32)$$

где  $\theta$  — угол между вектором  $\beta$  и направлением излучения. Мощность, излучаемая в единичный телесный угол, составляет

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2 \dot{\beta}^2 \sin^2 \theta}{16\pi^2 \epsilon_0 c}. \quad (33)$$

После интегрирования полная мощность излучения есть

$$P = \frac{e^2 \dot{\beta}^2}{6\pi \epsilon_0 c}. \quad (34)$$

Этот результат был получен Дж. Лармором.

## 8. ИЗЛУЧЕНИЕ УСКОРЕННОГО ЗАРЯДА В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ОБЛАСТИ

Приближение Лармора (33) неприменимо к зарядам, движущимся с релятивистскими скоростями. Если ускорение занимает настолько короткий промежуток времени, что векторы  $\beta$  и  $\dot{\beta}$  остаются постоянными по величине и направлению, а наблюдение осуществляется из удаленной точки, так что значения  $\hat{n}$  и  $R$  в процессе ускорения изменяются незначительно, то для мощности излучения можно написать выражение

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c} \frac{|\hat{n} \times \{(\hat{n} - \beta) \times \dot{\beta}\}|^2}{(1 - \beta \cdot \hat{n})^5}. \quad (35)$$

Мы рассмотрим по отдельности случаи продольного и поперечного ускорения.

При продольном ускорении векторы  $\beta$  и  $\dot{\beta}$  параллельны, и (35) принимает вид

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2 \dot{\beta}^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c} \frac{\sin^2 \theta}{(1 - \beta \cdot \hat{n})^5}. \quad (36)$$

В пределе  $\beta \rightarrow 1$  знаменатель дроби стремится к нулю, и в распределении излучения появляется пик при угле

$$\theta_{\max} \approx \frac{1}{2\gamma}. \quad (37)$$

Таким образом, излучение в основном концентрируется в узком конусе вдоль направления движения частицы, как показано на рис. 15.4. Полная мощность излучения равна

$$P = \frac{e^2 \dot{\beta}^2 \gamma^6}{6\pi \epsilon_0 c} = \frac{e^2}{6\pi \epsilon_0 c^3} \frac{\dot{p}^2}{m^2}. \quad (38)$$

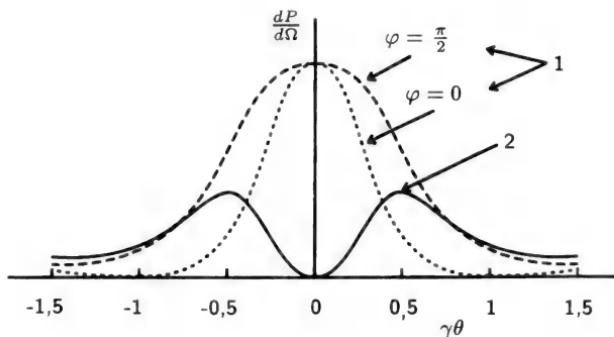


Рис. 15.4. Угловое распределение излучения, возникающего при ускорении релятивистского заряда, для случаев прямолинейного и кругового движения.

1 — круговое движение; 2 — прямолинейное движение

В случае равномерного кругового движения, при котором ускорение перпендикулярно направлению движения заряженной частицы, наблюдается так называемое синхротронное излучение с угловым распределением

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c} \frac{\dot{\beta}^2}{(1 - \beta \cos \theta)^3} \left[ 1 - \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\gamma^2 (1 - \beta \cos \theta)^2} \right]. \quad (39)$$

Это излучение максимально в направлении вперед ( $\theta = 0$ ), затем спадает до нуля, после чего достигает вторичного максимума. Излучение сосредоточено в плоскости орбиты. Сечение пучка напоминает овал или эллипс, главная ось которого совпадает с направлением оси орбиты ( $\varphi = \frac{1}{2}\pi$ , угловая ширина  $\approx 2/\gamma$ ), а малая ось лежит в плоскости вращения ( $\varphi = 0$ , а угловая ширина  $\approx 1/\gamma$ ), как показано на рис. 15.4. Полная мощность излучения равна

$$P = \frac{e^2 \dot{\beta}^2 \gamma^4}{6\pi \epsilon_0 c} = \frac{e^2}{6\pi \epsilon_0 c^3} \frac{\dot{p}^2 \gamma^2}{m^2}. \quad (40)$$

Сравнивая выражения для мощности излучения при ускорении в продольном и поперечном направлениях, можно отметить, что при одном и том же значении  $\dot{p}$  (т. е. одинаковой приложенной силе) излучение при поперечном ускорении оказывается в  $\gamma^2$  раз интенсивнее, чем при продольном. Однако в случае постоянного значения  $\dot{\beta}$  излучение в  $\gamma^2$  раз интенсивнее при продольном ускорении. Это

легко объяснить различием в величине производных от импульса  $p = \gamma mv$  в указанных случаях:

$$\begin{aligned}\dot{p} &= \gamma^3 m \dot{v} && \text{при линейном движении,} \\ \dot{p} &= \gamma m \dot{v} && \text{при круговом движении,}\end{aligned}\quad (41)$$

что легко проверить простым дифференцированием с учетом постоянства величины  $(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$  при круговом движении.

Излучение электронов регистрируется в плоскости орбиты в виде серии последовательных импульсов, по одному за оборот. При  $\beta \approx 1$  угловой раствор пучка излучения  $\theta \approx 1/\gamma$  возникает при прохождении электроном по орбите расстояния  $\rho\theta$ , где  $\rho$  — радиус орбиты. Импульсы длительностью  $\Delta t$

$$\Delta t \approx \rho/2\gamma^3 c \quad (42)$$

возникают с периодом  $T_0$

$$T_0 = 2\pi\rho/c, \quad (43)$$

где  $2\pi\rho$  — длина круговой орбиты. Детали приведены на рис. 15.5. Фурье-разложение импульса показывает, что пучок оказывается

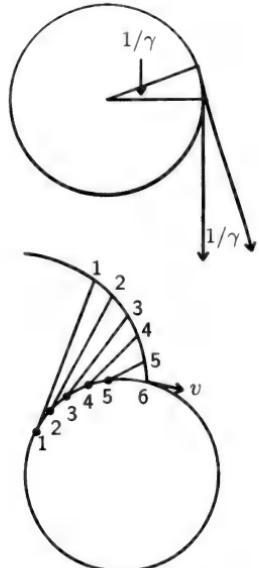


Рис. 15.5. Импульсы излучения длительностью  $\Delta t = \rho/2\gamma^3 c$ , испускаемые с периодом  $T_0 = 2\pi\rho/c$  при равномерном движении релятивистского заряда со скоростью  $v \sim c$  по круговой орбите радиусом  $\rho$ .

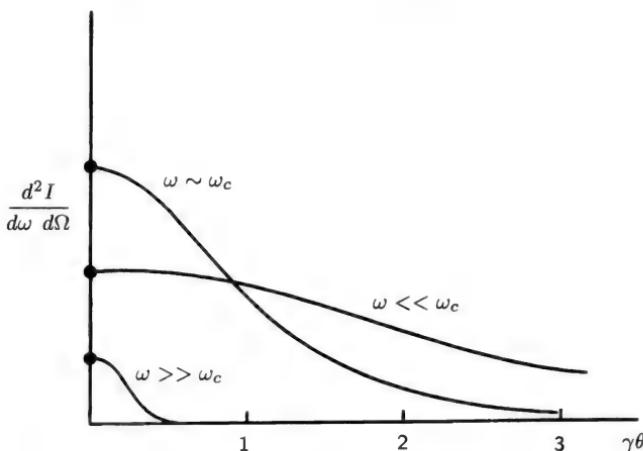


Рис. 15.6. Угловое распределение синхротронного излучения в случаях, когда частота  $\omega$  значительно больше, сравнима и значительно меньше критической частоты  $\omega_c$ .

широким и малоинтенсивным в области низких частот, узким и по-прежнему малоинтенсивным в области высоких частот, а основная доля интенсивности излучения  $d^2I/dw d\Omega$  сосредоточена в окрестностях критической частоты  $\omega_c$  (рис. 15.6)

$$\omega_c = 3\gamma^3 c / \rho, \quad (44)$$

которая близка к обратной ширине (длительности) импульса  $\Delta t$  (42).

Ультрарелятивистские заряды, испытывая кратковременное произвольное ускорение, испускают синхротронное излучение, сравнимое по интенсивности с излучением заряда, движущегося непрерывно с постоянной скоростью по круговой орбите.

## 9. ЧЕРЕНКОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Еще один тип излучения быстро движущихся частиц наблюдается при движении частиц в среде со скоростью, превышающей скорость света в данной среде, которая равна  $c/n = c/[\varepsilon(\omega)/\varepsilon_0]^{1/2}$ , где  $n$  – показатель преломления. Качественная картина волновых фронтов излучения показана на рис. 15.7. Если скорость частицы  $v$  меньше  $c/n$ , то волновые фронты полей  $E$  и  $B$  всегда опережают частицу, как показано на рис. 15.7,а, и излучение не возникает. Однако

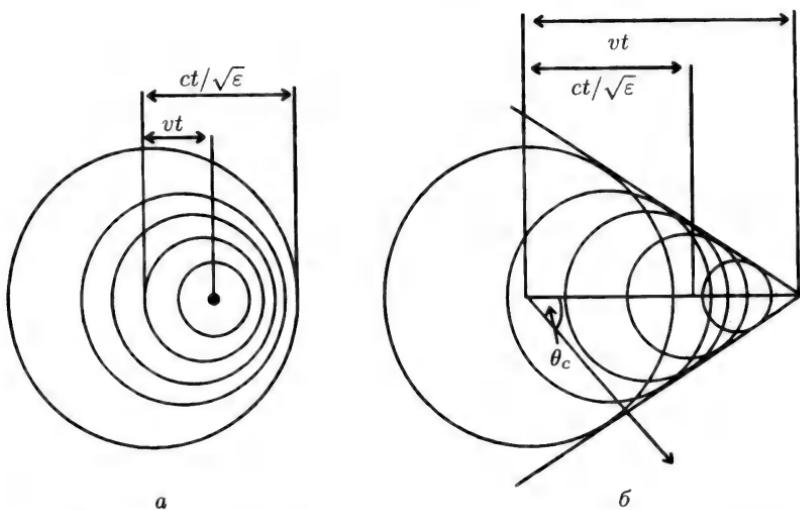


Рис. 15.7. Черенковское излучение. Волновые фронты, создаваемые заряженной частицей, скоростью которой (a) ниже скорости света в данной среде ( $v < c/n$ ) и (b) выше этой величины. Во втором случае возникает излучение под углом  $\theta_c$ , определяемым выражением (46).

если скорость частицы превышает скорость света в данной среде, частица опережает фронт распространения волны, как показано на рис. 15.7, б. В этом случае существует угол  $\theta_c$ , под которым распространяется фронт волн. Угол  $\theta_c$  называется углом черенковского излучения, а его величина определяется соотношением

$$\cos \theta_c = \frac{v_{\text{свет}} t}{v_{\text{част}} t}, \quad (45)$$

из которого следует

$$\cos \theta_c = \frac{1}{\beta [\epsilon(\omega)/\epsilon_0]^{1/2}}. \quad (46)$$

Излучение испускается под углом  $\theta_c$ , поэтому, измеряя этот угол и зная величину диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  данного вещества, можно определить скорость электрона. Поскольку диэлектрическая проницаемость представляет собой функцию частоты  $\epsilon(\omega)$ , свет различной частоты излучается под несколько различающимися углами. Излучение легко наблюдать в виде слабого свечения воды, окружающей активную зону ядерного реактора. Излучение линейно поляризовано в плоскости, образуемой траекторией частицы и направлением наблюдения.

## 10. ПЕРЕХОДНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Мы уже показали, что заряженная частица, движущаяся с большой скоростью в среде, увлекает за собой электрическое и магнитное поля, характер которых зависит от скорости частицы и от свойств среды. Когда частица внезапно переходит из одной среды в другую, то при подходе к границе раздела сред и после пересечения этой границы поля перестраиваются. На определенном отрезке траектории  $D$  (его называют глубиной формирования) поля, возникающие в различных точках траектории, интерферируют, в результате чего возникает излучение (в основном в области углов  $\theta \leq 1/\gamma$ ). Глубина формирования равна

$$D \approx \gamma c / \omega_p \approx \gamma \lambda_p / 2\pi, \quad (47)$$

а спектр излучения содержит частоты вплоть до  $\omega \approx \omega_p$ , где  $\omega_p$  — плазменная частота, а  $\lambda_p$  — плазменная длина волны.

## ПРОХОЖДЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Проходя через вещество, тяжелая заряженная частица взаимодействует с окружающим ядро электронным облаком, не теряя при столкновениях сколько-нибудь заметной энергии и лишь незначительно отклоняясь от первоначального пути. Тем не менее большая часть потерь энергии частицами складывается в результате многочисленных столкновений с электронами, хотя эти следующие друг за другом потери энергии очень слабо влияют на отклонение частицы от своей траектории. Основной механизм рассеяния частиц на большие углы обусловлен их столкновениями с более массивными ядрами. Значительная часть энергии теряется на излучение, возникающее в результате ускорений, испытываемых заряженными частицами при прохождении через вещество. Этот процесс может быть основным механизмом потерь энергии ультрарелятивистских заряженных частиц.

### 2. КУЛОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ

Рассмотрим показанное на рис. 16.1 столкновение быстрой частицы с зарядом  $ze$  и импульсом  $p = \gamma Mv$  при прицельном параметре  $b$  с покоящимся электроном массой  $m$ . Электрическое поле заряда, определяемое уравнением (24) гл. 15, передает электрону поперечный импульс  $\Delta p$ , равный

$$\Delta p = \int_{-\infty}^{\infty} eE_{\perp}(t)dt = \frac{ze^2}{2\pi\epsilon_0 bv}. \quad (1)$$



Рис. 16.1. Прицельный параметр  $b$  быстрой налетающей частицы с зарядом  $ze$  и импульсом  $\gamma M v$  при рассеянии на электроне с зарядом  $e$  и массой  $m$ .

Этот импульс соответствует передаваемой электрону энергии

$$\Delta E(b) = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{2z^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2mv^2} \frac{1}{b^2}. \quad (2)$$

Более точное рассмотрение дает

$$\Delta E(b) = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{2z^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2mv^2} \cdot \frac{1}{b^2 + b_{\min}^2}. \quad (3)$$

Минимальный прицельный параметр  $b_{\min}$  можно оценить, приравняв энергию электрона энергии кулоновского взаимодействия при максимальном сближении частиц

$$\gamma mv^2 = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 b_{\min}}. \quad (4)$$

Этот результат получен в классической физике. В квантовой механике минимальный прицельный параметр вычисляют, приравнивая момент импульса постоянной Планка

$$\gamma mv b_{\min} = \hbar. \quad (5)$$

Из этих двух значений в формулу (3) следует подставить наибольшее. При скорости  $\beta = \alpha = 1/137$  оба значения одинаковы.

Если время столкновения значительно превышает период орбитального движения электрона  $\tau = 1/\omega$ , результат воздействия электрического поля налетающей частицы усреднится, и будет передана лишь незначительная доля энергии. Процесс усреднения особенно важен для прицельных параметров, превышающих величину  $b_{\max}$ , которая определяется выражением

$$\gamma v = \omega b_{\max}. \quad (6)$$

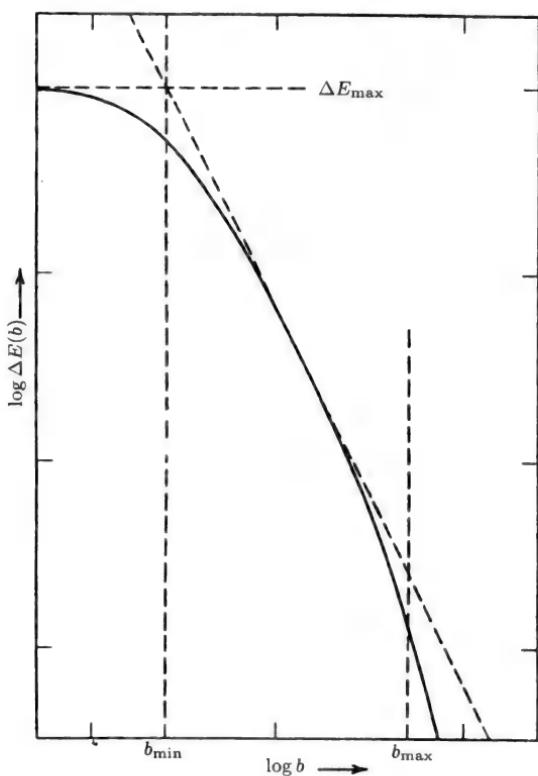


Рис. 16.2. Зависимость передаваемой энергии  $\Delta E$  от прицельного параметра  $b$  для случая кулоновского рассеяния (J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Wiley, New York, 1975, рис. 13.2). (Имеется перевод: Дж. Джексон, Классическая электродинамика. — М.: Мир, 1965.)

Зависимость передаваемой электрону энергии от прицельного параметра приведена на рис. 16.2. В области средних значений параметра, т. е. при  $b_{\min} < b < b_{\max}$ , зависимость  $\log \Delta E$  от  $\log b$  описывается прямой, тангенс угла наклона которой равен  $-2$  в соответствии с (2). Кулоновские столкновения при  $b < b_{\max}$  сопровождаются передачей значительной энергии, а при больших значениях  $b$  ( $b > b_{\max}$ ) столкновения становятся «адиабатическими» и сопровождаются ничтожной передачей энергии.

Экспериментально обычно измеряют потери энергии на единице пути в веществе, т. е. величину  $dE/dx$ . Для среды, содержащей  $N$

атомов с атомным номером  $Z$  в единице объема, интегрирование по прицельному параметру приводит к выражению

$$\frac{dE}{dx} = NZ \frac{z^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m v^2} \log(b_{\max}/b_{\min}). \quad (7)$$

На рис. 16.3 показана зависимость  $dE/dx$  от отношения кинетической энергии частицы  $E_K$  к энергии покоя  $Mc^2$  (при этом кинетическая энергия  $E_K$  определяется как разность полной энергии  $\gamma Mc^2$  и энергии покоя частицы  $Mc^2$ ), т. е.

$$E_K = (\gamma - 1)Mc^2 \quad (8)$$

или

$$(\gamma - 1) = E_K/Mc^2. \quad (9)$$

Можно выделить две граничные области для величины  $(\gamma - 1)$

$$(\gamma - 1) \approx \begin{cases} \beta^2/2 & \beta \ll 1, \gamma \sim 1 \\ \gamma & \beta \approx 1, \gamma \gg 1. \end{cases} \quad (10)$$

На рис. 16.3 не учтен так называемый эффект плотности, вследствие которого поляризация среды экранирует поле частицы и уменьшает потери энергии ультрарелятивистских частиц ( $\gamma \gg 1$ ).

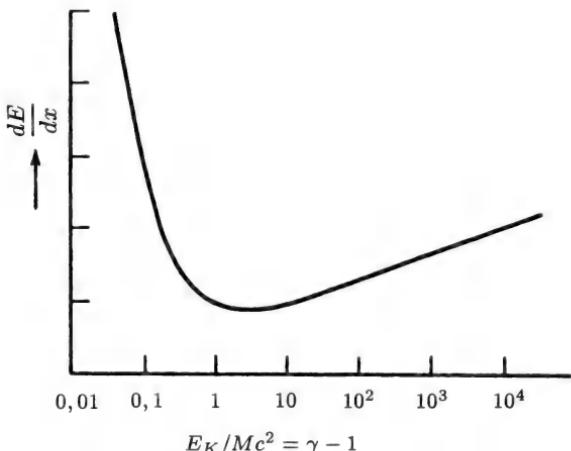


Рис. 16.3. Потери энергии при кулоновском рассеянии частиц с кинетической энергией  $E_K$ . (J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Wiley, New York, 1975, рис. 13.4).

### 3. СТОЛКНОВЕНИЯ С ЯДРАМИ

Рассеяние на большие углы связано главным образом со столкновениями налетающей частицы с атомными ядрами. Столкновения с электронами вызывают потери энергии, но слабо влияют на изменения направления движения. Угол отклонения быстрой налетающей частицы с импульсом  $p = \gamma Mv$  и зарядом  $ze$  можно оценить, пренебрегая эффектом экранирования атомными электронами. Угол рассеяния такой частицы ядром с зарядом  $Ze$  составляет

$$\theta \approx \Delta p/p, \quad (11)$$

что с учетом (1) приводит к выражению

$$\theta = \frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 p v b}. \quad (12)$$

В классической теории дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma/d\Omega$ , согласно выражению (45) гл. 2, имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (13)$$

В случае малых углов ( $\sin \theta \approx \theta$ ) это приводит к

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \left( \frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 p v} \right)^2 \frac{1}{\theta^4}. \quad (14)$$

Для нерелятивистских частиц и больших углов рассеяния классическая формула рассеяния Резерфорда (46) гл. 2 в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \left( \frac{zZe^2}{8\pi\epsilon_0 M v^2} \right)^2 \operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2}\theta, \quad (15)$$

справедлива и в квантовой механике.

При больших прицельных параметрах углы рассеяния малы и существенна экранировка ядра атомными электронами. Вследствие этого в формуле присутствует поправочный коэффициент, препятствующий неограниченному росту сечения при стремлении  $\theta$  к нулю

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \left( \frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 p v} \right)^2 \frac{1}{(\theta^2 + \theta_{\min}^2)^2}, \quad (16)$$

где

$$\theta_{\min} = \begin{cases} \frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 p v a} & \text{в классической теории,} \\ \hbar/pa & \text{в квантовой механике,} \end{cases} \quad (17)$$

а величина  $a = 1,4a_0/Z^{1/3}$  представляет собой радиус атома ( $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_ec^2$  — боровский радиус).

При малых прицельных параметрах углы рассеяния велики, и необходимо учитывать конечную величину радиуса ядра  $R$ , который связан с числом нуклонов  $A$  соотношением

$$R = \frac{1}{2}r_0 A^{1/3}, \quad (18)$$

где  $r_0$  — классический радиус электрона, значение которого можно найти, приравняв энергию покоя электрона  $m_ec^2$  собственной кулоновской энергии  $e^2/4\pi\epsilon_0 r_0$ , т. е.

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_ec^2} = \alpha^2 a_0 = 2,28 \cdot 10^{-15} \text{ м} \quad (19)$$

( $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \sim 1/137$  — постоянная тонкой структуры). Конечная величина радиуса ядра (18) позволяет вычислить максимальный угол рассеяния, согласно квантовой механике равный

$$\theta_{\max} = \frac{\hbar}{pR} = \frac{274}{\beta\gamma A^{1/2}}. \quad (20)$$

Резерфордовское рассеяние на большие углы происходит достаточно редко. В большинстве случаев частицы проходят через вещество, отклоняясь на небольшие углы, обусловленные большим числом актов слабого резерфордовского рассеяния. Большие отклонения скорее всего связаны с однократным рассеянием с малым прицельным параметром.

#### 4. ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Мы уже отмечали, что основной механизм потери энергии проходящими через вещество частицами связан с их взаимодействием с атомными электронами. Передача энергии электронам при этом происходит благодаря передаче импульса. В случае относительно медленных частиц ( $v \ll c$ ) при этом излучается незначительная мощность  $P$  в соответствии с нерелятивистской формулой Лармора (34), гл. 15, которая имеет вид

$$P = \frac{z^2 e^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}. \quad (21)$$

Это излучение связано с ускорением  $\mathbf{a} = \dot{\beta}\mathbf{c}$ , испытываемым частицей при передаче импульса. Однако в случае релятивистских частиц основную долю потери энергии составляет излучение, связанное с передачей импульса, которое называют тормозным.

Интенсивность излучения частицы с зарядом  $ze$ , движущейся с релятивистской скоростью  $\beta$  и испытывающей незначительное изменение скорости  $\Delta\beta$ , в пределе  $\omega \rightarrow 0$  имеет вид

$$\frac{d^2I}{d\omega d\Omega} = \frac{z^2 e^2}{16\pi^3 \epsilon_0 c} \left[ \varepsilon^* \cdot \left( \frac{\Delta\beta + \hat{\mathbf{n}} \times (\beta \times \Delta\beta)}{(1 - \hat{\mathbf{n}} \cdot \beta)^2} \right) \right]^2, \quad (22)$$

согласно которому излучение с поляризацией  $\varepsilon^*$  испускается в направлении  $\hat{\mathbf{n}}$ . Формулу в явном виде (см. книгу Джексона) можно получить для случаев поляризации, параллельной и перпендикулярной плоскости, в которой лежат векторы  $\beta$  и  $\hat{\mathbf{n}}$ . Используя разложение в степенной ряд знаменателя (22) для излучения под малыми углами относительно скорости  $\beta$ , можно записать

$$1 - \hat{\mathbf{n}} \cdot \beta = 1 - \beta \cos \theta \approx \frac{1 + \gamma^2 \theta^2}{2\gamma^2}. \quad (23)$$

Таким образом, излучение максимально в узком конусе относительно направления движения, т. е. при

$$\theta < 1/\gamma = Mc^2/E_K, \quad (24)$$

где для случая  $\gamma \gg 1$  использовано выражение (9).

Рентгеновское излучение на практике обычно получают, бомбардируя электронными пучками металлические мишени (типа вольфрама, меди или молибдена). При соударении электронов происходят переходы между низшими энергетическими уровнями атомов (например, между уровнями с  $n = 1$  и  $n = 2$  в вольфраме), в результате чего возникают узкие рентгеновские линии, энергии которых соответствуют характеристическому излучению атома. Кроме того, падающие электроны быстро тормозятся в металле, в результате чего возникает непрерывное рентгеновское излучение, которое по своей природе является тормозным излучением.

## 5. ТОМСОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ

Если свободная частица с массой  $m$  и зарядом  $q$  оказывается в поле плоской электромагнитной волны, то под воздействием электрического поля волны частица будет ускоряться и, следовательно, излучать. Дифференциальная мощность такого излучения частицы с зарядом  $q = e$  определяется выражением (33) гл. 15 и имеет вид

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c} \dot{\beta} \sin^2 \theta. \quad (25)$$

В результате интегрирования по  $\theta$  это выражение переходит в формулу (21). Процесс можно также рассматривать как рассеяние падающего излучения. В случае неполяризованного падающего излучения сечение рассеяния дается известной формулой Томсона

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \theta)r_0^2, \quad (26)$$

где  $r_0$  — классический радиус электрона (19). Интегрирование (26) по углам приводит к полному сечению томсоновского рассеяния свободным зарядом  $e$ .

$$\sigma = (8\pi/3)r_0^2 \approx 0,66 \cdot 10^{-28} \text{ м}^2. \quad (27)$$

## МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Момент импульса — по существу понятие классической механики, но основную роль он играет в квантовой механике, в которой повсеместно используется операторный подход и важное значение имеют перестановочные соотношения и алгебраический формализм. В данной главе мы рассмотрим обладающие определенной симметрией выражения, содержащие операторы градиента, лапласианы и сферические гармоники, а также орбитальный момент, спин и схемы их связи. В заключение обсудим коэффициенты Клебша — Гордана и неприводимые тензоры.

### 2. ИМПУЛЬС И МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Импульс  $p$  отдельной частицы в теории относительности определяется выражением

$$p = \gamma m v, \quad (1)$$

где  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$  и  $\beta = v/c$ . Однако в этой главе мы рассматриваем нерелятивистский случай  $\beta \ll 1$  и  $\gamma \approx 1$ , так что

$$p = m v, \quad (2)$$

причем три декартовы составляющие  $p_i = m v_i$ ,  $i = x, y, z$ . Импульс  $p_x$  свободной частицы сопряжен с координатой  $x$ .

В табл. 17.1 приведены сопряженные переменные для свободной частицы в цилиндрических и сферических координатах. Три из них являются моментами импульса, поскольку они соответствуют угловым переменным. В классической механике вектор момента импульса  $\mathbf{L}$  можно записать в виде

$$\mathbf{L} = I \boldsymbol{\omega}, \quad (3)$$

Таблица 17.1. Сопряженные координаты и импульсы.

Цилиндрические координаты		Сферические координаты	
$\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$	$p_\rho = m\dot{\rho}$	$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$	$p_r = m\dot{r}$
$\varphi = \operatorname{arctg}(y/x)$	$p_\varphi = m\rho^2\dot{\varphi}$	$\theta = \arccos(z/r)$	$p_\theta = mr^2\dot{\theta}$
$z$	$p_z = m\dot{z}$	$\varphi = \operatorname{arctg}(y/x)$	$p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}$

где момент инерции  $I$  определен в гл. 3. Например, для  $p_\varphi$  в цилиндрических координатах  $I = m\rho^2$  и  $\omega = \dot{\varphi}$ , а для  $p_\theta$  в сферических координатах  $I = mr^2$  и  $\omega = \dot{\theta}$ .

Момент импульса принято определять как векторное произведение радиуса-вектора  $\mathbf{r}$  и импульса  $\mathbf{p}$ :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (4)$$

Момент силы  $\mathbf{N}$  определяется выражением

$$\mathbf{N} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}, \quad (5)$$

и мы имеем следующие уравнения для прямолинейного и вращательного движения:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{N}. \quad (7)$$

В случае постоянной массы и постоянного момента инерции уравнения принимают более простой вид:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}, \quad (8)$$

$$I\ddot{\theta} = \mathbf{N}. \quad (9)$$

Для системы частиц эти уравнения можно просуммировать по частицам, внешним и внутренним силам и моментам силы. Импульс  $\mathbf{p}$  сохраняется в отсутствие внешних сил, действующих на систему, а при отсутствии внешних моментов силы сохраняется момент импульса  $\mathbf{L}$ .

### 3. ОПЕРАТОРЫ МОМЕНТОВ

В квантовой механике импульс  $\mathbf{p}$  и момент импульса  $\mathbf{L}$  являются операторами:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar \left\{ \hat{\mathbf{i}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{j}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \quad (10)$$

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla = i\hbar \left\{ -\hat{\varphi}_0 \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\theta}_0 \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}. \quad (11)$$

Последнее выражение получается, если угловую часть оператора градиента записать в сферических координатах:

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}}_0 \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}_0 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi}_0 \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (12)$$

и использовать соотношения для единичных векторов  $\mathbf{r}_0 \times \hat{\theta}_0 = \hat{\varphi}_0$  и  $\hat{\mathbf{r}}_0 \times \hat{\varphi}_0 = -\hat{\theta}_0$ , а также вспомнить, что  $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}_0$ . Составляющая вектора  $\mathbf{L}$  вдоль оси  $z$  дается выражением

$$L_z = -i\hbar \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13)$$

В сферических координатах составляющие  $L_x$  и  $L_y$  имеют значительно более сложный вид. Квадрат оператора полного момента импульса

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (14)$$

записывается как

$$L^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (15)$$

и выражается через оператор Лапласа  $\nabla^2$  в сферических координатах

$$L^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla^2 + \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (16)$$

Другое важное соотношение имеет вид

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}. \quad (17)$$

Импульс и момент импульса удовлетворяют некоторым перестановочным соотношениям, причем коммутатор величин  $A$  и  $B$  определяется следующим образом:

$$[A, B] = AB - BA. \quad (18)$$

Перестановочные соотношения для импульса имеют вид

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad (19)$$

$$[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (20)$$

Составляющие момента импульса удовлетворяют следующим коммутаторам:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k, \quad (21)$$

где символ Леви—Чивита  $\varepsilon_{ijk}$  равен  $+1$  для четной перестановки индексов и  $-1$  для нечетной перестановки и равен нулю, если какие-либо два индекса оказываются одинаковыми. Каждая составляющая  $L_i$  момента  $\mathbf{L}$  коммутирует с квадратом полного момента  $L^2$ :

$$[L^2, L_i] = 0. \quad (22)$$

Сферические гармоники  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$  являются собственными функциями угловой части лапласиана, и, следовательно, собственными функциями момента импульса. Любая сферическая гармоника зависит от  $\varphi$  как  $e^{iM\varphi}$ , и из (13) следует, что

$$L_z Y_{LM} = M Y_{LM}, \quad (23)$$

т. е. целое  $M$  является собственным значением оператора  $L_z$ . Оператор квадрата полного момента  $L^2$  удовлетворяет простому уравнению на собственные значения

$$L^2 Y_{LM} = L(L+1) Y_{LM}. \quad (24)$$

Линейные комбинации  $L_+$  и  $L_-$  соответственно  $x$ - и  $y$ -компонент момента  $\mathbf{L}$ :

$$L_+ = L_x + iL_y, \quad L_- = L_x - iL_y, \quad (25a)$$

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-), \quad L_y = -\frac{1}{2}i(L_+ - L_-) \quad (25b)$$

называются лестничными операторами, поскольку они удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\begin{aligned} L_{\pm} Y_{LM} &= [L(L+1) - M(M \pm 1)]^{1/2} Y_{LM \pm 1} = \\ &= [(L \mp M)(L \pm M + 1)]^{1/2} Y_{LM \pm 1} \end{aligned} \quad (26)$$

для сферических гармоник.

#### 4. ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ И СПИН

Мы рассмотрели момент  $\hbar L$ , который наглядно можно представить как результат движения одного тела по орбите вокруг другого. Величина  $L$  принимает только целочисленные значения, которые являются собственными значениями оператора Лапласа. Кроме того, существует собственный момент, или спин  $\hbar S$ , который можно представить как момент импульса, возникающий при вращении тела вокруг собственной оси, и он может принимать целые или полуцелые значения:  $S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ . В случае когда частица вращается как по орбите, так и вокруг своей оси, можно ввести

вектор полного момента  $\mathbf{J}$ , который является суммой орбитальной и спиновой составляющих:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (27)$$

где  $\hbar$  для удобства мы опустили. Полный момент может принимать значения в диапазоне

$$|L - S| \leq J \leq L + S. \quad (28)$$

Состояние электрона описывается символом Рассела—Саундерса  $^{2S+1}L_j$ , где для орбитальных состояний  $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  употребляются спектроскопические обозначения: S, P, D, F, G, H, ... . Таким образом в случае  $S = ^1/2$ ,  $L = 2$ , согласно (28), мы получаем  $J = ^3/2$  и  $J = ^5/2$ , причем состояние  $J = ^3/2$ , например, обозначается как  $^2D_{3/2}$ .

Мы рассмотрели отдельный электрон. В многоэлектронной или в многочастичной системе каждая частица характеризуется орбиталью  $L_i$  и спином  $S_i$ , определяющими ее полный момент  $J_i$ . Для вычисления полного момента системы  $\mathbf{J}$  используются обычно два метода. Один из них, называемый связью Рассела—Саундерса, состоит в вычислении полных орбитального и спинового моментов системы:

$$\mathbf{L} = \sum \mathbf{L}_i, \quad (29)$$

$$\mathbf{S} = \sum \mathbf{S}_i \quad (30)$$

и последующем их векторном сложении с помощью выражения (27) при учете условия (28), в результате чего получается набор разрешенных значений полного момента  $\mathbf{J}$ .

Второй метод, называемый  $jj$ -связью (сильной связью), состоит в вычислении сначала значений  $\mathbf{J}_i$  для каждой частицы

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i \quad (31)$$

и затем их векторном сложении, что дает полный момент  $\mathbf{J}$ :

$$\mathbf{J} = \sum \mathbf{J}_i. \quad (32)$$

На практике встречается несколько конечных значений  $\mathbf{J}$  и их можно восстановить, используя одну из связей. Связь Рассела—Саундерса обычно свойственна атомам, особенно легким, в то время как  $jj$ -связь характерна для тяжелых атомов и ядер.

## 5. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Мы рассмотрели схемы связи моментов, не предполагая, как они могут проявляться. К простейшим относится спин-орбитальное взаимодействие  $\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , где  $\lambda$  — постоянная спин-орбитальной связи. Это взаимодействие может расщепить вырожденное орбитальное состояние  $^{2S+1}L$  на  $J$  состояний с различной энергией. Чтобы определить величину этого расщепления, напишем векторное тождество

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{S}^2. \quad (33)$$

Из (24) известно, что оператор  $\mathbf{L}^2$  имеет  $L(L+1)$  собственных значений, а операторы  $\mathbf{S}^2$  и  $\mathbf{J}^2$  имеют соответственно  $S(S+1)$  и  $J(J+1)$  собственных значений, что позволяет написать с помощью (33) следующее равенство:

$$\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}\lambda[J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)]. \quad (34)$$

В частном случае  $L = 1$ ,  $S = 1/2$  имеется два состояния  $J$ , обозначаемые  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$ , и энергии

$$\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \begin{cases} \frac{1}{2}\lambda & \text{для } J = 3/2 \quad (^2P_{3/2} \text{ четыре состояния } M_J) \\ -\lambda & \text{для } J = 1/2 \quad (^2P_{1/2} \text{ два состояния } M_J) \end{cases} \quad (35)$$

Как видно, центр масс уровней энергии сохраняется, что характерно для расщеплений уровней по моменту импульса.

Аналогичным взаимодействию  $\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  является сверхтонкое взаимодействие  $T$  между спином электрона  $S$  и спином ядра  $I$ . Оно может быть изотропным в виде  $T \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}$  или анизотропным и записываться как тензор. В системе главных осей мы имеем следующее операторное выражение:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{I} = T_{xx}S_xI_x + T_{yy}S_yI_y + T_{zz}S_zI_z = \quad (36)$$

$$= \frac{1}{4}T_{xx}(S_+ + S_-)(I_+ + I_-) - \frac{1}{4}T_{yy}(S_+ - S_-)(I_+ - I_-) + T_{zz}S_zI_z, \quad (37)$$

в котором использовано (25). При наличии орбитального движения можно ввести полный момент  $\mathbf{F}$ , определяемый следующим образом:

$$\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{S} + \mathbf{I}. \quad (38)$$

Для вычисления этого полного момента импульса используется несколько схем связи.

## 6. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ И КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША—ГОРДАНА

Существует два основных способа представления волновых функций двух электронных конфигураций  ${}^2P_J$  в (35), для которых  $L = 1$  и  $S = {}^1/2$ . Одна из схем квантования состоит в том, что шести состояниям  $M_L, M_S$  приписываются собственные значения  $|M_L, M_S\rangle$ :

$$|M_L, M_S\rangle : | -1, \frac{1}{2} \rangle, | -1, -\frac{1}{2} \rangle, | 0, \frac{1}{2} \rangle, | 0, -\frac{1}{2} \rangle, | 1, \frac{1}{2} \rangle, | 1, -\frac{1}{2} \rangle. \quad (39)$$

Другой способ заключается в приписывании последовательности собственных значений  $|J, M\rangle$  в рамках  $J, M$ -схемы, где

$$\begin{aligned} -J \leq M \leq +J, \\ M = M_L + M_x t 5S \end{aligned} \quad (40)$$

и  $M_J$  обозначено как  $M$ . В данном случае  $J$  может быть равно  $1/2$  или  $3/2$ , что дает дублет и квартет с шестью собственными значениями  $|J, M\rangle$ :

$$\begin{aligned} \text{дублет } {}^2P_{1/2} &| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle, | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle, \\ \text{квартет } {}^2P_{3/2} &| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle, | \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle, | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle, | \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Полное вырождение одинаково в обеих схемах квантования, так что имеется всего  $N$  состояний

$$\sum (2J + 1) = (2S + 1)(2L + 1) = N, \quad (42)$$

где суммирование проводится по  $J$  состояниям и для случая  ${}^2P_J$  дает

$$2 + 4 = 2 \times 3 = 6, \quad (43)$$

т. е. шесть состояний.

Волновые функции  $|J, M\rangle$  для уровней  $| \frac{1}{2}, M \rangle$  и  $| \frac{3}{2}, M \rangle$ , расщепленных за счет спин-орбитального взаимодействия, можно записать в виде линейных комбинаций шести состояний  $|M_L, M_S\rangle$ :

$$|J, M\rangle = \sum a_i |M_{Li}, M_{Si}\rangle, \quad (44)$$

где  $\sum a_i^2 = 1$ , и для дублета  ${}^2P_{1/2}$ , т. е.  $| \frac{1}{2}, M \rangle$  имеем

$$\begin{aligned} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle &= -\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} | 1, -\frac{1}{2} \rangle + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} | 0, \frac{1}{2} \rangle, \\ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle &= \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} | -1, \frac{1}{2} \rangle - \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} | 0, -\frac{1}{2} \rangle, \end{aligned} \quad (45)$$

а для квартета  ${}^2P_{3/2}$ , т. е.  $|\frac{3}{2}, M\rangle$ , находим

$$\begin{aligned} |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= |1, \frac{1}{2}\rangle, \\ |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} |1, -\frac{1}{2}\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |0, \frac{1}{2}\rangle, \\ |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} |-1, \frac{1}{2}\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |0, -\frac{1}{2}\rangle, \\ |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= |1, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (46)$$

В этих выражениях коэффициенты, которые мы будем обозначать  $\langle LSM_L M_S | JM \rangle$  или в сокращенной записи  $\langle M_L M_S | JM \rangle$ , называются коэффициентами Клебша—Гордана. Например, используя приведенные выше выражения, находим

$$\begin{aligned} \langle 1\frac{1}{2} | \frac{3}{2} \frac{3}{2} \rangle &= 1, \\ \langle -1\frac{1}{2} | \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \rangle &= 1/\sqrt{3}. \end{aligned} \quad (47)$$

Если условия (40) не выполняются, то коэффициент Клебша—Гордана равен нулю. Коэффициенты вещественны и удовлетворяют условиям ортогональности

$$\begin{aligned} \sum \langle M_L M_S | JM \rangle \langle M_L M_S | J' M' \rangle &= \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \\ \sum \langle M_L M_S | JM \rangle \langle M'_L M'_S | JM \rangle &= \delta_{M_L M'_L} \delta_{M_S M'_S}, \end{aligned} \quad (48)$$

где первое суммирование выполняется по  $M_L$ ,  $M_S$ , а второе по  $J$ ,  $M$ . Ненулевые коэффициенты для рассматриваемого случая можно записать в виде следующей таблицы, где присутствуют только те состояния, для которых  $M_S = M - M_L = \pm \frac{1}{2}$ :

$M_L = 1$	$M_L = 0$	$M_L = -1$
$J = \frac{3}{2}, M = -\frac{3}{2}$	—	—
$J = \frac{3}{2}, M = -\frac{1}{2}$	—	$\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}$
$J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2}$	$\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}$
$J = \frac{3}{2}, M = +\frac{3}{2}$	1	—
$J = \frac{1}{2}, M = -\frac{1}{2}$	—	$-\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}$
$J = \frac{1}{2}, M = +\frac{1}{2}$	$-\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}$

Элементы этой таблицы согласуются с коэффициентами в (45) и (46). Ее можно свести к следующей таблице, в которой  $M$  прини-

Таблица 17.2. Общая форма коэффициентов Клебша—Гордана для частных случаев  $j_2 = 1/2$  и  $j_2 = 1$  с использованием соглашения о знаках Кондона—Шортли<sup>1</sup>.

$J_2 = 1/2$			
$m_2 \setminus J =$	$j_1 + \frac{1}{2}$	$j_1 - \frac{1}{2}$	
$+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{M}{2j_1+1}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{M}{2j_1+1}}$	
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{M}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{M}{2j_1+1}}$	струт
$J_2 = 1$			
$m_2 \setminus J =$	$j_1 + 1$	$j_1$	$j_1 - 1$
$+1$	$\sqrt{\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{2(j_1+1)(2j_1+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_1+M)(j_1-M+1)}{2j_1(j_1+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{2j_1(2j_1+1)}}$
$0$	$\sqrt{\frac{(j_1-M+1)(j_1+M+1)}{(j_1+1)(2j_1+1)}}$	$\frac{M}{\sqrt{j_1(j_1+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1+M)}{j_1(2j_1+1)}}$
$-1$	$\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1-M+1)}{2(j_1+1)(2j_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1-M)(j_1+M+1)}{2j_1(j_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1+M)(j_1+M+1)}{2j_1(2j_1+1)}}$

<sup>1</sup> Condon E. U., Shortley G. H., The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, 1953, p. 76. (Имеется перевод: Кондон Е., Шортли Г., Теория атомных спектров. — М.: ИЛ, 1949.) Эта классическая работа дает аналогичные выражения для  $j_2 = 3/2$  и  $j_2 = 2$ .

мает значения  $M_L \pm 1/2$ :

$$\begin{aligned}
 M_L &= 1 & M_L &= 0 & M_L &= -1 \\
 J &= \frac{3}{2} \left\{ \frac{(\frac{1}{2}+M)(\frac{3}{2}+M)}{6} \right\}^{1/2} & \left\{ \frac{(\frac{3}{2}-M)(\frac{3}{2}+M)}{3} \right\}^{1/2} & \left\{ \frac{(\frac{1}{2}-M)(\frac{3}{2}-M)}{6} \right\}^{1/2} \\
 J &= \frac{1}{2} - \left\{ \frac{(\frac{1}{2}+M)(\frac{3}{2}-M)}{\frac{3}{2}} \right\}^{1/2} & \frac{2M}{[3]^{1/2}} & \left\{ \frac{(\frac{1}{2}-M)(\frac{3}{2}+M)}{\frac{3}{2}} \right\}^{1/2}
 \end{aligned} \tag{50}$$

В табл. 17.2 представлены общие выражения для коэффициентов Клебша—Гордана  $\langle j_1 j_2 M_1 M_2 | JM \rangle$ , соответствующие  $j_2 = 1/2$  и  $j_2 = 1$ ; выражения для случаев более высокого порядка можно найти у других авторов. В табл. 17.3 приведены характерные коэффициенты для конкретных случаев. Аналогичные коэффициенты были предложены Вигнером ( $3-j$  символы) и Рака ( $V$  коэффициенты).

Таблица 17.3. Коэффициенты Клебша—Гордана для различных конкретных случаев с использованием соглашения о знаках Кондона—Шортли<sup>1</sup>.

Notation:		Coefficients		+3/2	
		$1_1 \times 1_1$	$J \quad J \dots$	$1 \times 1/2$	$3/2 \quad +1/2$
$1/2 \times 1/2$	$+1$	$m_1 \quad m_2$	$m_1 \quad m_2$	$-1 \quad +1/2$	$1 \quad 3/2 \quad 1/2$
$+1/2 \quad +1/2$	$1$	$m_1 \quad m_2$	$m_1 \quad m_2$	$+1 \quad -1/2$	$1/3 \quad 2/3$
$+1/2 \quad -1/2$	$1/2 \quad 1/2$	$m_1 \quad m_2$	$m_1 \quad m_2$	$0 \quad +1/2$	$2/3 \quad -1/3$
$-1/2 \quad +1/2$	$1/2 \quad -1/2$	$m_1 \quad m_2$	$m_1 \quad m_2$		
$2 \times 1$	$+2$	$1 \quad +1$	$0$		
$+3/2 \quad +1/2$	$1$	$2 \quad 1$	$0$		
$+3/2 \quad -1/2$	$1/4 \quad 3/4$	$2 \quad 1$	$0$		
$-1/2 \quad +1/2$	$3/4 \quad -1/4$	$1/2 \quad 1/2$	$0$		
$+1/2 \quad -1/2$	$1/2 \quad 1/2$	$1/2 \quad 1/2$	$0$		
$-1/2 \quad +1/2$	$1/2 \quad -1/2$	$1/2 \quad 1/2$	$0$		
$1 \times 1$	$+2$	$1 \quad +1$	$0$		
$+1 \quad +1$	$1$	$2 \quad 1$	$0$		
$+1 \quad +1$	$0 \quad +1$	$1/2 \quad 1/2$	$0$		
$+1 \quad -1$	$1/2 \quad -1/2$	$2 \quad 0$	$0$		
$0 \quad 0$	$0 \quad 0$	$1/6 \quad 1/2$	$1/3 \quad 1/3$		
$+1 \quad 0$	$8/15 \quad 1/6$	$2/3 \quad -1/3$	$0 \quad -1/3$		
$0 \quad +1$	$6/15 \quad -1/2$	$1/10 \quad 1/10$	$1/6 \quad -1/2$		
$2 \times 1$	$+3$	$3 \quad 2$	$1$		
$+2 \quad +1$	$1$	$3 \quad 2$	$1$		
$+2 \quad 0$	$1/3 \quad 2/3$	$3 \quad 2$	$1$		
$+1 \quad +1$	$2/3 \quad -1/3$	$0 \quad +1$	$1/2 \quad -1/2$		
$+2 \quad -1$	$1/15 \quad 1/3$	$3/5 \quad 0$	$1/6 \quad 1/2$		
$+1 \quad 0$	$8/15 \quad 1/6$	$-3/10 \quad 0$	$2/3 \quad 0$		
$0 \quad +1$	$6/15 \quad -1/2$	$1/10 \quad 1/10$	$1/6 \quad -1/2$		
$2 \times 3/2$	$+2$	$3 \quad 2$	$1$		
$+2 \quad +2$	$1$	$3 \quad 2$	$1$		
$+2 \quad +1$	$3/7 \quad 4/7$	$4/7 \quad -3/7$	$7/2 \quad 5/2$		
$+1 \quad +2$	$4/7 \quad -3/7$	$+2 \quad -1/2$	$1/7 \quad 16/35$		
$+2 \quad -1/2$	$1/7 \quad 16/35$	$2/5 \quad 0$	$1/2 \quad 1/2$		
$+1 \quad 1/2$	$4/7 \quad 1/7$	$1/35 \quad -2/5$	$1/5 \quad 3/5$		
$0 \quad 0$	$3/2 \quad 2/7$	$-18/35 \quad 2/5$	$1/3 \quad -1/3$		
$2 \times 2$	$+4$	$4 \quad +3$	$0$		
$+2 \quad +2$	$1$	$4 \quad 3$	$0$		
$+2 \quad +1$	$1/2 \quad 1/2$	$4 \quad 3$	$0$		
$+1 \quad +2$	$1/2 \quad -1/2$	$4 \quad 2$	$0$		
$+2 \quad 0$	$3/14 \quad 1/2$	$2/7 \quad 0$	$1/14 \quad 3/10$		
$+1 \quad 1$	$4/7 \quad 0$	$-3/7 \quad 0$	$3/7 \quad 1/5$		
$0 \quad 2$	$3/14 \quad -1/2$	$2/7 \quad 0$	$-1/7 \quad -1/14$		
$+1 \quad -1$	$1/14 \quad 3/10$	$3/7 \quad -1/14$	$3/7 \quad -1/10$		
$-1 \quad +1$	$3/7 \quad -1/14$	$1/5 \quad 1/5$	$1/7 \quad 1/10$		
$-1 \quad +1$	$1/14 \quad -3/10$	$3/7 \quad -1/10$	$2/7 \quad -1/5$		
$4 \quad 3 \quad 2 \quad 1$	$+1$	$0$	$0$	$0$	$0$
$+1 \quad -1$	$1/14 \quad 3/10$	$3/7 \quad 1/5$	$1/70 \quad 1/10$		
$0 \quad 0$	$3/7 \quad 1/5$	$-1/14 \quad -3/10$	$2/35 \quad 2/5$		
$-1 \quad +1$	$3/7 \quad -1/14$	$1/5 \quad 1/5$	$18/35 \quad 0$		
$-1 \quad +1$	$1/14 \quad -3/10$	$3/7 \quad -1/10$	$1/35 \quad -2/5$		
$4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \quad 0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$
$+2 \quad -2$	$1/70 \quad 1/10$	$2/7 \quad 2/5$	$1/14 \quad -1/10$		
$+1 \quad +1$	$3/35 \quad 2/5$	$1/14 \quad -1/10$	$0 \quad -3/7$		
$0 \quad 0$	$18/35 \quad 0$	$-3/7 \quad 0$	$1/5 \quad 1/5$		
$-1 \quad 1$	$1/35 \quad -2/5$	$1/14 \quad 1/10$	$-1/7 \quad 1/10$		
$-2 \quad 2$	$1/20 \quad -1/10$	$2/7 \quad -1/5$	$1/35 \quad 1/5$		

Примечание: Ради экономии места показаны лишь коэффициенты для  $M \geq 1/2$ . Коэффициенты для  $M < 0$  можно получить из соотношения симметрии  $(J, -M|j_1, -m_1; j_2, -m_2) = (-1)^{j_1+j_2-J} (J, M|j_1, m_1; j_2, m_2)$ . Следует учитывать то, что в каждой графе стоит число, из которого необходимо извлечь квадратный корень, как в табл. 17.2. Таким образом,  $-4/5$  нужно читать как  $-2/\sqrt{5}$ .

<sup>1</sup> The Physics Quick Reference Guide (ed. E. R. Cohen), AIP Press, New York, 1996, p. 180.

## 7. НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРЫ

В квантовой механике многие операторы можно представить в виде неприводимых тензоров, называемых иногда неприводимыми сферическими тензорами и обозначаемых  $T_k^q$ , где

$$-k \leq q \leq +k. \quad (51)$$

Например, неприводимыми являются векторный оператор  $V_1^q$  при  $k = 1$  и  $q = 0, \pm 1$ :

$$\begin{aligned} V_1^1 &= -\frac{V_x + iV_y}{\sqrt{2}}, \\ V_1^0 &= V_z, \\ V_1^{-1} &= \frac{V_x - iV_y}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (52)$$

и тензорный оператор электрического квадруполя  $Q_2^q$ , у которого  $k = 2$  и  $q = 0, \pm 1, \pm 2$ :

$$\begin{aligned} Q_2^0 &= 2A[3I_z^2 - I(I+1)], \\ Q_2^{\pm 1} &= \sqrt{6}A[I_z(I_x \pm iI_y) + (I_x \pm iI_y)I_z], \\ Q_2^{\pm 2} &= \sqrt{6}A(I_x \pm iI_y)^2, \end{aligned} \quad (53)$$

где  $I_i$  — спина ядра и  $A = eQ/4I(2I-1)$ .

Неприводимый тензор  $T_k^q$  удовлетворяет перестановочным соотношениям, аналогичным правилам коммутации момента импульса

$$[J_z, T_k^q] = qT_k^q,$$

$$[J_{\pm}, T_k^q] = [k(k+1) - q(q \pm 1)]^{1/2} T_k^{q \pm 1} = [(k \mp q)(k \pm q + 1)]^{1/2} T_k^{q \pm 1}. \quad (54)$$

В соответствии с теоремой Вигнера—Эккарта матричный элемент  $\langle \tau J M | T_k^q | \tau' J' M' \rangle$  неприводимого оператора можно записать в виде

$$\langle \tau J M | T_k^q | \tau' J' M' \rangle = \langle \tau J | T_k | \tau' J' \rangle \langle J' k M' q | J' k J M \rangle, \quad (55)$$

где правая часть зависит от коэффициента Клебша—Гордана  $\langle J' k M' q | J' k J M \rangle$  и приведенного матричного элемента  $\langle \tau J | T_k | \tau' J' \rangle$ , который является характеристикой оператора и не зависит от  $M$ ,  $M'$  и  $q$ . Дополнительное квантовое число  $\tau$  присутствует только в приведенном матричном элементе.

## МАТРИЧНАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Существует несколько способов изложения содержания квантовой механики. Один из них состоит в использовании дифференциальных уравнений, другой основан на операторах. В этой главе мы рассмотрим матричный подход и изложим его, используя матрицы момента импульса.

### 2. МАТРИЦЫ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

В гл. 3 мы обсуждали некоторые свойства спиновых матриц Паули. Эти матрицы связаны с тремя декартовыми компонентами для частицы со спином  $1/2$ :

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Матрицы для спина более высокого порядка образуются с помощью коэффициента  $[(J \mp M)(J \pm M + 1)]^{1/2}$  в выражении (26), гл. 17:

$$J_{\pm} |M\rangle = [(J \pm M)(J \mp M + 1)]^{1/2} |M| \pm 1. \quad (2)$$

Этот коэффициент позволяет построить треугольную таблицу, симметричную относительно вертикальной оси:

$$\begin{array}{ll} J = \frac{1}{2}, & \sqrt{1} \\ J = 1, & \sqrt{2} \sqrt{2} \\ J = \frac{3}{2}, & \sqrt{3} \sqrt{2 \cdot 2} \sqrt{3} \\ J = 2, & \sqrt{4} \sqrt{3 \cdot 2} \sqrt{2 \cdot 3} \sqrt{4} \\ J = \frac{5}{2}, & \sqrt{5} \sqrt{4 \cdot 2} \sqrt{3 \cdot 3} \sqrt{2 \cdot 4} \sqrt{5} \\ J = 3, & \sqrt{6} \sqrt{5 \cdot 2} \sqrt{4 \cdot 3} \sqrt{3 \cdot 4} \sqrt{2 \cdot 5} \sqrt{6} \\ J = \frac{7}{2}, & \sqrt{7} \sqrt{6 \cdot 2} \sqrt{5 \cdot 3} \sqrt{4 \cdot 4} \sqrt{3 \cdot 5} \sqrt{2 \cdot 6} \sqrt{7}. \end{array} \quad (3)$$

Строка, отвечающая спину  $J$ , имеет структуру

$$\begin{aligned} & \sqrt{(2J) \cdot (1)} \sqrt{(2J-1) \cdot (2)} \sqrt{(2J-2) \cdot (3)} \\ & \sqrt{(2J-3) \cdot (4)} \dots \sqrt{(1) \cdot (2J)}. \end{aligned}$$

Числа в этом треугольнике представляют собой диагональные элементы матрицы  $J = \frac{1}{2}$  и матриц более высокого порядка  $J_x$  и  $J_y$ , с заменой в матрице  $J_y$  единицы на  $\pm i$ . У  $J_z$ -матриц по диагонали стоят значения  $M$ . Матрицы для  $J = \frac{1}{2}, 1$  и  $\frac{3}{2}$ , заимствованные из книги *C. P. Poole, Jr., H. A. Farach, Theory of Magnetic Resonance* (Wiley, New York, 1987), записываются следующим образом:

$$\begin{array}{l} \text{Единичная} \\ \text{матрица} \end{array} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} \vec{J}_x & \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\ & \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4b)$$

$$\begin{aligned} \vec{J}_y & \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\ & \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3}i & 0 & 0 \\ \sqrt{3}i & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -\sqrt{3}i \\ 0 & 0 & \sqrt{3}i & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4b)$$

$$\vec{J}_z \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad (4c)$$

$$\vec{J}^2 \rightarrow \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{15}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4d)$$

$$\vec{J}^+ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4e)$$

$$\vec{J}^- \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4ж)$$

Эти матрицы эрмитовы, т. е.  $M_{ij} = M_{ji}^*$ , и имеют нулевой след. Кроме того, здесь приведены соответствующие единичные матрицы, а матрицы для лестничных операторов  $J_+$  и  $J_-$  определяются выражениями

$$\begin{aligned} J_+ &= J_x + iJ_y, \\ J_- &= J_x - iJ_y. \end{aligned} \quad (5)$$

Это вещественные матрицы, получаемые из  $J_x$  и  $J_y$  матричным сложением, как показано в гл. 27, разд. 5, они могут быть также построены на основе треугольника (3). Мы видим, что матрица для  $J^2$  получается из выражения

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (6)$$

с помощью матричного умножения [т. е.  $J_x^2 = (J_x)(J_x)$ ] и последующего матричного сложения (6) и равна единичной матрице, умноженной на величину  $J(J+1)$ , которая является собственным значением  $J^2$ . Матрицы момента удовлетворяют стандартным правилам коммутации

$$[J_i, J_j] = iJ_k \quad (i, j, k — \text{циклическая перестановка}), \quad (7)$$

$$[J^2, J_k] = 0 \quad (k = x, y, z), \quad (8)$$

что можно доказать, выполняя перемножение матриц.

### 3. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ ИМПУЛЬСА

В гл. 17 мы рассмотрели сложение двух моментов:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2. \quad (9)$$

В матричном представлении оно выполняется с помощью разложения прямого произведения, описанного в разд. 5 гл. 27. Например, для любой декартовой компоненты

$$J_x = J_{1x} + J_{2x} \quad (10)$$

мы образуем прямые произведения с помощью единичных матриц  $U_1$  и  $U_2$ :

$$J_x = (J_{1x}) \times (U_2) + (U_1) \times (J_{2x}); \quad (11)$$

здесь  $U_i$  — единичная матрица размерности  $J_{xi}$ . Выполняя разложение для случая  $J_1 = \frac{1}{2}$  и  $J_2 = \frac{1}{2}$ , имеем

$$J_x = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

и, производя сначала разложение по прямым произведениям, а затем матричное сложение, получим

$$J_x = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Стоящая справа матрица  $4 \times 4$  представляет собой прямое произведение, отвечающее матричному представлению  $J_x$ .

#### 4. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА В ВОДОРОДЕ

В качестве примера использования формализма прямых произведений рассмотрим атом водорода в основном электронном состоянии с  $L = 0$  и  $S = \frac{1}{2}$ . Кроме того, имеется спин ядра  $I = \frac{1}{2}$  у протона, так что в наших обозначениях мы имеем дело с системой  $J_1 = S = \frac{1}{2}$  и  $J_2 = I = \frac{1}{2}$ . Запишем гамильтониан для эффекта Зеемана в сильном магнитном поле и будем считать, что квантование спинов происходит на направление магнитного поля  $B_z$ .

Гамильтониан  $\mathcal{H}$  собственного магнитного момента электрона  $g\mu_B S$  и собственного магнитного момента ядра  $-g_N\mu_N I$  в магнитном поле  $\mathbf{B} = kB$  имеет вид

$$\mathcal{H} = g\mu_B S_z B - g_N\mu_N I_z B + TS \cdot \mathbf{I}, \quad (14)$$

где в правой части первые два члена являются электронным и ядерным зеемановскими членами соответственно, причем  $g\mu_B/g\mu_N = 660$ , а  $TS \cdot \mathbf{I}$  представляет собой сверхтонкое взаимодействие между электронным и ядерным спинами, которое мы определили в разд. 5

гл. 17. Гамильтониан в виде прямого произведения матриц записывается следующим образом:

$$\mathcal{H} = g\mu_B(S_z) \times (U) - g_N\mu_N B(U) \times (I_z) + T[(S_x) \times (I_x) + (S_y) \times (I_y) + (S_z) \times (I_z)]; \quad (15)$$

здесь матрицы обозначены скобками, а  $U$  — единичная матрица  $2 \times 2$ .

Мы видим, что каждая матрица  $S_i$  стоит слева в паре прямых произведений, а каждая матрица  $I_i$  — справа. Если одна из матриц отсутствует, как в зеемановских членах, то ее, как показано, заменяет единичная матрица. Если вставить фактические матрицы, гамильтониан принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2}g\mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}g_N\mu_N B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \\ & + \frac{1}{4}T \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ & \left. + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Вычисляя прямые произведения и выполняя сложение матриц получаем  $4 \times 4$ -матрицу гамильтониана

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & a_{32} & 0 \\ 0 & a_{23} & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{1}{2}g\mu_B B - \frac{1}{2}g_N\mu_N B + \frac{1}{4}T; \\ a_{22} &= \frac{1}{2}g\mu_B B + \frac{1}{2}g_N\mu_N B - \frac{1}{4}T; \\ a_{23} &= \frac{1}{2}T; a_{32} = \frac{1}{2}T; \\ a_{33} &= -\frac{1}{2}g\mu_B B - \frac{1}{2}g_N\mu_N B - \frac{1}{4}T; \\ a_{44} &= -\frac{1}{2}g\mu_B B + \frac{1}{2}g_N\mu_N B + \frac{1}{4}T, \end{aligned}$$

которая дает непосредственно два значения энергии, а также  $2 \times 2$ -матрицу, эквивалентную квадратному уравнению, относительно двух других значений энергии. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{2}g\mu_B B - \frac{1}{2}g_N\mu_N B + \frac{1}{4}T, \\ E_2 &= -\frac{1}{4}T + \frac{1}{2}[(g\mu_B + g_N\mu_N B)^2 B^2 + T^2]^{1/2}, \\ E_3 &= -\frac{1}{4}T - \frac{1}{2}[(g\mu_B + g_N\mu_N B)^2 B^2 + T^2]^{1/2}, \\ E_4 &= -\frac{1}{2}g\mu_B B + \frac{1}{2}g_N\mu_N B + \frac{1}{4}T. \end{aligned} \quad (18)$$

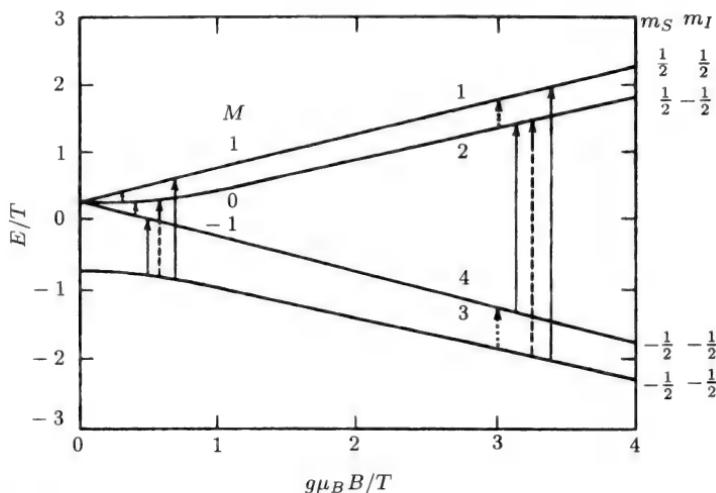
Волновые функции, отвечающие первой и четвертой энергиям, известны точно, в то время как двум другим состояниям отвечают смешанные волновые функции

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \\ |E_2\rangle &= \alpha \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + \gamma \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \\ |E_3\rangle &= \gamma^* \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle - \alpha^* \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \\ |E_4\rangle &= \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

с условием нормировки

$$\alpha\alpha^* + \gamma\gamma^* = 1. \quad (20)$$

Величины  $\alpha$  и  $\gamma$  являются коэффициентами Клебша–Гордана и также представляют собой элементы унитарной матрицы  $U$ , которая



**Рис. 18.1.** Зеемановские энергии (18) атома водорода в зависимости от приложенного магнитного поля  $B$ . Показаны разрешенные (—) и слабо запрещенные (---) переходы, отвечающие электронному спиновому резонансу (ЭСР), а также переходы в сильном поле, отвечающие ядерному магнитному резонансу (ЯМР) (...). Линии для слабого поля обозначены в соответствии с волновыми функциями  $|J, M\rangle$ , а для сильного поля — как  $|m_S, m_I\rangle$ , причем  $M = m_S + m_I$ . (Из книги: C. P. Poole, Jr., H. A. Farach, Theory of Magnetic Resonance, 2nd Ed, Wiley, New York, 1987, p. 48.)

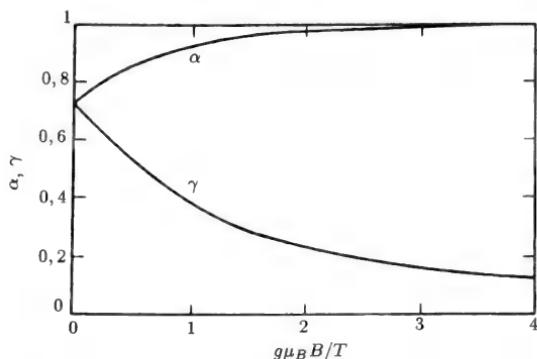


Рис. 18.2. Коэффициенты  $\alpha$  и  $\gamma$  в выражениях (19) в зависимости от безразмерного отношения  $g\mu_B B/T$ . (Из книги: C. P. Poole, Jr., H. A. Farach, Theory of Magnetic Resonance, 2nd Ed, Wiley, New York, 1987, p. 51.)

диагонализует матрицу гамильтониана

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & \gamma & 0 \\ 0 & \gamma^* & -\alpha^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

На рис. 18.1 и 18.2 показаны зависимости энергий  $E_i$  и коэффициентов  $\alpha$  и  $\gamma$  от отношения  $g\mu_B B/T$ . Мы видим, что вблизи нулевого магнитного поля величины  $\alpha$  и  $\gamma$  принимают значение  $\sqrt{1/2}$ , а в сильном магнитном поле  $\alpha \Rightarrow 1$  и  $\gamma \ll 1$ . Для разрешенных правилами отбора переходов в электронном спиновом резонансе (ЭСР) в слабом магнитном поле ( $3 \Rightarrow 4$  и  $3 \Rightarrow 1$ )  $\Delta M = \pm 1$ , а в сильном поле ( $3 \Rightarrow 1$  и  $4 \Rightarrow 2$ )  $\Delta m_S = \pm 1$ ,  $\Delta m_I = 0$ , где  $M = m_S + m_I$ . В случае ядерного магнитного резонанса (ЯМР) правила отбора для разрешенных переходов ( $2 \Rightarrow 1$  и  $3 \Rightarrow 4$ ) таковы:  $\Delta m_S = 0$ ,  $\Delta m_I = \pm 1$ .

## 5. ОБЩАЯ МАТРИЦА ГАМИЛЬТОНИАНА

Мы рассмотрели построение матриц гамильтониана с помощью прямых произведений. Если необходимо построить такую матрицу в более общем случае, начинают обычно с записи гамильтониана  $\mathcal{H}$  в виде основной части  $\mathcal{H}_0$ , для которой уже известны собственные функции  $\phi_{0j} = |j\rangle$  и собственные значения  $E_{0j}$ , и добавки к ней  $\mathcal{H}'$ ,

собственные функции и собственные значения которой необходимо вычислить:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' . \quad (22)$$

В этом базисе  $|j\rangle$  основной гамильтониан, или гамильтониан нулевого порядка  $\mathcal{H}_0$  будет диагональным:

$$\langle i | \mathcal{H}_0 | j \rangle = E_{0j} \delta_{ij}, \quad (23)$$

и необходимо вычислить диагональные и недиагональные матричные элементы  $\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle$  дополнительного гамильтониана  $\mathcal{H}'$ . Предполагая, что в базисном наборе присутствуют лишь четыре члена, матрицу полного гамильтониана  $\mathcal{H}$  можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} E_{01} + \langle 1 | \mathcal{H}' | 1 \rangle & \langle 1 | \mathcal{H}' | 2 \rangle & \langle 1 | \mathcal{H}' | 3 \rangle & \langle 1 | \mathcal{H}' | 4 \rangle \\ \langle 2 | \mathcal{H}' | 1 \rangle & E_{02} + \langle 2 | \mathcal{H}' | 2 \rangle & \langle 2 | \mathcal{H}' | 3 \rangle & \langle 2 | \mathcal{H}' | 4 \rangle \\ \langle 3 | \mathcal{H}' | 1 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}' | 2 \rangle & E_{03} + \langle 3 | \mathcal{H}' | 3 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}' | 4 \rangle \\ \langle 4 | \mathcal{H}' | 1 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}' | 2 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}' | 3 \rangle & E_{04} + \langle 4 | \mathcal{H}' | 4 \rangle \end{pmatrix}; \quad (24)$$

здесь было использовано выражение (23). Эта эрмитова матрица может быть приведена к диагональному виду унитарным преобразованием или может быть решена исходя из детерминанта, если обозначить диагональные члены через  $-\lambda$ , что эквивалентно решению квадратного уравнения. Для получения приближенного решения можно использовать теорию возмущений, как мы покажем в гл. 22. Для энергий нулевого порядка след обычно равен нулю:

$$\sum E_{0i} = E_{01} + E_{02} + E_{03} + E_{04} = 0, \quad (25)$$

а для возмущенных членов первого порядка (диагональных) имеем

$$\langle i | \mathcal{H}' | i \rangle = \langle 1 | \mathcal{H}' | 1 \rangle + \langle 2 | \mathcal{H}' | 2 \rangle + \langle 3 | \mathcal{H}' | 3 \rangle + \langle 4 | \mathcal{H}' | 4 \rangle = 0, \quad (26)$$

что помогает найти решение. Недиагональные члены  $\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle$  дают поправки к энергии второго порядка.

# ГЛАВА 19

---

## УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Один из основных методов квантовой механики состоит в написании гамильтониана  $\mathcal{H}$  системы, представлении его в операторной форме и решении соответствующего дифференциального уравнения, называемого уравнением Шредингера. Эта глава начинается с краткого обсуждения временной зависимости, после чего основное внимание будет уделяться стационарному уравнению Шредингера. Возможности этого уравнения иллюстрируются решением задач о прямоугольной потенциальной яме и трехмерном гармоническом осцилляторе. В некоторых случаях будут использованы результаты других глав. В заключение обсуждается вырождение, связанное с орбитальным моментом.

### 2. ГАМИЛЬТОНИАН

Начнем с рассмотрения волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , удовлетворяющей уравнению Шредингера

$$\mathcal{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (1)$$

Квадрат модуля волновой функции  $|\psi|^2$  представляет собой плотность вероятности, которая ассоциируется с плотностью потока вероятности  $\mathbf{J}_\psi$ ; эти величины совместно удовлетворяют уравнению непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \cdot \mathbf{J}_\psi = 0, \quad (2)$$

выражающему сохранение вероятности.

Плотность потока вероятности  $\mathbf{J}_\psi$  связана с волновой функцией  $\psi$  через оператор скорости  $-i(\hbar/m)\nabla$ :

$$\mathbf{J}_\psi = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]. \quad (3)$$

Зависимость произвольного оператора  $\mathbf{A}$  от времени определяется гамильтонианом системы  $\mathcal{H}$ :

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \mathbf{A}], \quad (4)$$

где  $[\mathcal{H}, \mathbf{A}]$  обозначает коммутатор  $\mathcal{H}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathcal{H}$ . Среднее значение физической величины  $\langle \mathbf{A} \rangle$ , отвечающей оператору  $\mathbf{A}$ , может быть найдено интегрированием по пространству

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int \psi^* \mathbf{A} \psi d\tau. \quad (5)$$

Чтобы получить стационарное уравнение Шредингера, зависимость от времени в уравнении (1) следует считать гармонической  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iE/\hbar}$ , что дает

$$\mathcal{H}\psi = E\psi. \quad (6)$$

Гамильтониан частицы имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}); \quad (7)$$

подстановка вместо импульса  $\mathbf{p}$  соответствующего оператора  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  приводит к уравнению Шредингера в обычной форме

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi. \quad (8)$$

Решение этого уравнения позволяет найти энергетические уровни и собственные функции. В настоящей главе особое внимание будет уделяться потенциалам  $V(r)$ , являющимся функцией радиальной переменной  $r$  в сферической системе координат

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}. \quad (9)$$

Примерами таких потенциалов могут служить кулоновское поле  $-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ , потенциал изотропного трехмерного гармонического осциллятора  $\frac{1}{2}kr^2$ , а также трехмерные прямоугольные потенциальные ямы. В следующей главе будут рассмотрены различные виды одномерных потенциалов.

### 3. ОПЕРАТОР ЛАПЛАСА И РАДИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ

В монографии *Математические методы в физике и химии* [The Mathematics of Physics and Chemistry. (D. Van Nostrand, NY, 1943)] Маржено и Мерфи приводят 11 координатных систем, в которых переменные в уравнении Шредингера разделяются, и его решение записывается в виде произведения решений по каждой из переменных. В число этих систем, разумеется, входят декартова, цилиндрическая и сферическая системы координат. Рассмотрим здесь сферическую систему координат. Спин частицы пока учитывать не будем.

В гл. 28 приведено выражение для лапласиана  $\nabla^2$  в сферических координатах; подстановка его в уравнение Шредингера (8) дает

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi + V(r) \psi = E \psi. \quad (10)$$

Волновая функция в данном случае факторизуется, т. е.  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{L,M}(\theta, \varphi)$ , где угловая часть  $Y_{L,M}(\theta, \varphi)$  представляет собой сферическую гармонику, т. е. произведение полинома Лежандра  $P_L^M(\cos \theta)$  и экспоненты  $e^{iM\varphi}$ . Подстановка в (10) позволяет получить уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R + V(r)R = ER \quad (11)$$

для радиальной части волновой функции  $R(r)$ . Его решение зависит от вида потенциала  $V(r)$ .

В качестве примера рассмотрим атом водорода с кулоновским потенциалом

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (12)$$

В гл. 21 будет показано, что волновая функция (электрона) является произведением экспоненциального фактора  $e^{-1/2\rho}$  и полинома Лагерра, где  $\rho = 2Zr/na_0$ ,  $n$  — главное квантовое число, и  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$  — боровский радиус. Уровни энергии

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (13)$$

отрицательны и обратно пропорциональны квадрату квантового числа  $n$ . В гл. 21 будет показано, что с точностью до величин второго порядка малости включительно энергия зависит также и от

орбитального квантового числа  $L$ . Для заданного уровня  $n$  величина  $L$  может принимать любое значение в диапазоне

$$L = 0, 1, \dots, n - 1, \quad (14)$$

так что соответствующие орбитальные состояния не будут различаться по энергии.

#### 4. ТРЕХМЕРНАЯ ПРЯМОУГОЛЬНАЯ ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА

Простейшим примером трехмерного потенциала является трехмерная прямоугольная потенциальная яма, для которой  $V(r) = -V_0$  внутри и  $V(r) = 0$  вне ямы:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a. \end{cases} \quad (15)$$

Радиальная часть уравнения Шредингера в этих двух областях имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R + (V_0 + E)R = 0 \quad r < a, \quad (16)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R + ER = 0 \quad r > a. \quad (17)$$

Чтобы упростить эти уравнения, целесообразно ввести величины

$$\alpha = \left( \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad (18)$$

$$\beta = \left( \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2}; \quad (19)$$

знак модуля здесь использован потому, что энергия  $E$  принимает отрицательные значения.

Решения внутри ямы представляют собой сферические функции Бесселя  $j_L(\alpha r)$ , которые связаны с обычными функциями Бесселя  $J_{L+1/2}(\alpha r)$  соотношениями

$$j_L(r) = [\pi/2\alpha r]^{1/2} J_{L+1/2}(\alpha r); \quad (20)$$

функции двух низших порядков имеют вид

$$j_0(\alpha r) = \frac{\sin \alpha r}{\alpha r} \quad j_1(\alpha r) = \frac{\sin \alpha r}{\alpha^2 r^2} - \frac{\cos \alpha r}{\alpha r}. \quad (21)$$

Те же решения вне ямы представляют собой сферические функции Ханкеля  $h_L$ , спадающие с расстоянием быстрее чем  $e^{-\beta r}$ . Для сшивания решений вне ямы с решениями внутри ее необходимо потребовать непрерывность величины  $(1/R)dR/dr$  на границе ямы при  $r = a$ . Это условие приводит к трансцендентному уравнению, которое может быть решено только численно. Например, при  $L = 0$

$$\alpha \operatorname{tg} \alpha a = -\beta. \quad (22)$$

Для неглубокой ямы

$$V_0 < \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2 \quad (23)$$

имеется только одно решение при  $L = 0$ ; при больших  $L$  решения отсутствуют. Чем глубже яма, т. е. чем больше значение  $V_0$ , тем больше имеется решений. Эта ситуация аналогична случаю одномерной прямоугольной потенциальной ямы, рассматриваемому в следующей главе.

## 5. БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКАЯ ЯМА

В случае очень глубокой потенциальной ямы  $V_0 \gg \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$  отсчет энергии удобнее вести от дна ямы: при этом

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a, \\ +V_0 & r > a, \end{cases} \quad (24)$$

а  $\alpha$  и  $\beta$  оказываются равными

$$\alpha = \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad (25)$$

$$\beta = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad (26)$$

где энергия  $E$  считается теперь положительной.

Если допустить, что потенциал  $V_0$  принимает произвольно большие значения, то  $\beta$  также будет очень велико ( $E \ll V_0$ ), и волновая функция  $\approx e^{-\beta r}$  резко спадет до нуля сразу за границей ямы, поэтому в данном случае граничное условие для решения внутри ямы будет заключаться в обращении волновой функции в нуль на границе

$$j_L(\alpha a) = 0. \quad (27)$$

В этом случае  $\alpha a$  есть просто узел функции  $j_L$

$$\alpha a = \gamma_{L_n}, \quad (28)$$

где  $\gamma_{Ln}$  —  $n$ -й узел сферической функции Бесселя порядка  $L$ . Уровни энергии, как это следует из (25),

$$E_{Ln} = \frac{\hbar^2 \gamma_{Ln}^2}{2ma^2}. \quad (29)$$

Из соотношений (21) и (28) вытекает, что для состояния с  $L = 0$  величина  $\gamma_{0n}$  равна

$$\gamma_{0n} = n\pi \quad (30)$$

откуда для энергии

$$E_{0n} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (31)$$

При условии  $n \gg L$  решения для больших значений  $L$  можно получить, используя асимптотическое представление функции  $j_L(\alpha r)$

$$j_L(\alpha r) \sim \frac{1}{\alpha r} \sin \left( \alpha r - \frac{L\pi}{2} \right) \quad (32a)$$

$$\sim \frac{1}{\alpha r} \left[ \sin(\alpha r) \cos \left( \frac{L\pi}{2} \right) - \cos(\alpha r) \sin \left( \frac{L\pi}{2} \right) \right] \quad (32b)$$

с узлами в точках

$$\gamma_{Ln} = \frac{1}{2} L\pi + \pi k, \quad (33)$$

где  $k$  — целое число.

Таким образом, здесь можно различать случаи четных и нечетных состояний в зависимости от значения  $L$ .

## 6. ТРЕХМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Потенциал трехмерного гармонического осциллятора  $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$  не зависит от угловой переменной, так что уравнение Шредингера допускает разделение переменных в сферических координатах. Так же как и в случае прямоугольной ямы, волновая функция осциллятора представляет собой произведение радиальной части  $R(r)$  на сферическую гармонику  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ . Уравнение для радиальной части совпадает с уравнением (16), в котором  $-V_0$  заменяется на потенциал гармонического осциллятора.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] R + \left( -\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + E \right) R = 0. \quad (34)$$

Вместо того, чтобы искать решения этого уравнения, мы обсудим свойства его решений и затем сравним их с решениями, полученными в декартовой системе координат.

Решения уравнения (34) полиномиально зависят от  $r$  и содержат фактор  $e^{-\Gamma r^2/2}$ ; здесь

$$\Gamma = m\omega/\hbar, \quad (35)$$

$\omega$  — частота классического осциллятора, и уровни энергии определяются соотношением

$$E = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad (36)$$

где  $n$  принимает целые положительные значения  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Уровни энергии гармонического осциллятора не зависят от орбитального квантового числа  $L$ . Четность состояния гармонического осциллятора определяется так же, как и в случае прямоугольной потенциальной ямы

$$\begin{aligned} L &= 0, 2, \dots, n & n \text{ четное,} \\ L &= 1, 3, \dots, n & n \text{ нечетное.} \end{aligned} \quad (37)$$

Нумерация уровней гармонического осциллятора сдвинута на единицу по отношению к случаю прямоугольной потенциальной ямы. В данном случае низшему энергетическому уровню отвечает s-состояние ( $L = 0$ ), следующий уровень — p-состояние ( $L = 1$ ), третьему уровню ( $n = 2$ ) соответствуют s- и d-состояния, четвертому уровню ( $n = 3$ ) — p- и f-состояния и т. д.

Потенциал гармонического осциллятора, записанный в декартовой системе координат

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2), \quad (38)$$

приводит к уравнению Шредингера, расщепляющемуся на три независимых уравнения по каждой из пространственных переменных  $x, y, z$ ; эти уравнения имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (39)$$

Если ввести безразмерный энергетический параметр  $\alpha$  и безразмерную переменную  $u$

$$\alpha = 2E/\hbar\omega \quad u = (m\omega/\hbar)^{1/2}x, \quad (40)$$

уравнение Шредингера можно привести к виду

$$\frac{d^2 \psi}{du^2} + (\alpha - u^2)\psi = 0. \quad (41)$$

Поиск решения в виде

$$\psi(u) = e^{-u^2/2} H_n(u) \quad (42)$$

приводит к уравнению Эрмита

$$\frac{d^2 H_n}{du^2} - 2u \frac{dH_n}{du} + (\alpha - 1)H_n = 0, \quad (43)$$

где  $H_n(u)$  — полиномы Эрмита. Первые четыре полинома имеют вид

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 1, \\ H_1(u) &= 2u, \\ H_3(u) &= 4u^2 - 2, \\ H_4(u) &= 8u^3 - 12u, \end{aligned} \quad (44)$$

а уровни энергии определяются соотношением

$$E_n = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar\omega, \quad (45)$$

где  $\omega$  — частота классического осциллятора, как и в соотношении (36), приведенном выше.

Полная волновая функция представляет собой произведение трех волновых функций вида (42) для каждой из пространственных координат

$$\psi(x, y, z) = e^{-\Gamma r^2/2} H_n(u_x) H_n(u_y) H_n(u_z). \quad (46)$$

Энергия аддитивна по пространственным степеням свободы:

$$E_{n_x n_y n_z} = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar\omega. \quad (47)$$

Из сопоставления этого соотношения с выражением (36) для главного квантового числа следует

$$n = n_x + n_y + n_z. \quad (48)$$

Основное состояние  $E_{000}$ , отвечающее  $n = 0$ , представляет собой синглет (s-состояние), поскольку ему отвечает единственная комбинация  $n_x = n_y = n_z = 0$ . Следующий уровень энергии трехкратно вырожден, так как существуют три комбинации чисел  $n_x, n_y, n_z$ , при которых  $n = 1$ ; энергии, отвечающие этим комбинациям, одинаковы

$$E_{100} = E_{010} = E_{001}, \quad (49)$$

а соответствующие волновые функции  $x, y, z$ , описываемые полиномом Эрмита  $H_1$ , являются линейными комбинациями сферических гармоник  $x \pm iy$  и  $z$ , отвечающих р-состоянию  $L = 1$ , что разъясняется в гл. 28.

Состоянию с  $n = 2$  отвечают следующие шесть возможных комбинаций чисел  $n_x, n_y, n_z$ :

$$\begin{array}{ll} (110) & xy/r^2 \\ (101) & xz/r^2 \\ (011) & yz/r^2 \end{array} \quad \begin{array}{ll} (200) & 2[x^2 - r^2]/r^2, \\ (020) & 2[y^2 - r^2]/r^2, \\ (002) & 2[z^2 - r^2]/r^2. \end{array} \quad (50)$$

Как видно из приведенного в гл. 10 выражения (58) для тессеральной гармоники  $T_{2M}^j$ , три функции в левой колонке являются тессеральными гармониками второго ранга ( $L = 2$ ), а другие три функции — линейными комбинациями двух гармоник  $T_{2M}^j$  и функцией s-состояния  $[x^2 + y^2 + z^2]/r^2$ . Таким образом,  $n = 2$  отвечает комбинация s-состояния и d-состояния.

Рассмотрим состояние  $n = 3$  с несколько иной точки зрения. Существуют всего десять комбинаций чисел  $(n_x, n_y, n_z)$ , три из которых — вида (300), шесть — вида (120) и одна — десятая — вида (111). Имеется также всего десять величин третьего порядка, составленных из переменных  $x, y, z$ :

$$x^3, y^3, z^3, x^2y, x^2z, y^2x, y^2z, z^2x, z^2y, xyz; \quad (51)$$

семь из них отвечают f-состоянию, поскольку могут быть представлены в виде линейных комбинаций тессеральных гармоник с  $L = 3$ , оставшиеся три линейно независимые функции могут быть записаны в виде  $r^2x, r^2y$  и  $r^2z$  и отвечают p-состоянию. Таким образом, 10-кратно вырожденный уровень  $n = 3$  составляют p- и f-состояния.

Как видно из соотношения (37), энергетические уровни и соответствующие волновые функции обладают определенной четностью, т. е. демонстрируют либо положительную, либо отрицательную четность в зависимости от результата применения к ним оператора четности  $P$ :

$$P\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) = \pm\psi(x, y, z), \quad (52)$$

где знак плюс возникает при положительной четности, а знак минус — при отрицательной. Кратность вырождения каждого орбитального состояния равна  $2L + 1$ , так что суммарная кратность вырождения для каждого случая составляет

$$\begin{array}{ll} \sum(2L + 1) & L = 0, 2, \dots, n \quad n \text{ четное,} \\ \sum(2L + 1) & L = 1, 3, \dots, n \quad n \text{ нечетное.} \end{array} \quad (53)$$

Таблица 19.1. Четность и кратность вырождения уровней гармонического осциллятора.

<i>n</i>	Четность	Состояния	Значения <i>L</i>	Кратность вырождения
0	+	s	0	1
1	-	p	1	3
2	+	s, d	0, 2	6
3	-	p, f	1, 3	10
4	+	s, d, g	0, 2, 4	15
5	-	p, f, h	1, 3, 5	21

Суммарная кратность вырождения для обоих типов четности может быть представлена в виде частичных сумм натурального ряда чисел *m*:

$$\sum_{m=1}^{n+1} m = 1, 3, 6, 10, \dots \quad \text{и} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (54)$$

в пределах от *m* = 1 до *m* = *n* + 1. Сказанное иллюстрируется в табл. 19.1, где использованы принятые в спектроскопии обозначения s, p, d, f, ... для орбитальных состояний; определение этих состояний приведено в гл. 17 после соотношения (28). Некоторые виды взаимодействий, такие, как спин-орбитальное взаимодействие или эффект Зеемана, способны снять это вырождение.

## ГЛАВА 20

---

# ОДНОМЕРНЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Одномерные системы допускают простое математическое описание и их изучение позволяет осмыслить основные принципы квантовой механики, не увязая в деталях. На примере этих систем удается проиллюстрировать распространение и отражение волн, условия на границе раздела сред, удержание частиц в потенциальной яме, возможновение связанных и свободных состояний и т. д. Это помогает прояснить многие принципиальные положения квантовой теории.

### 2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение Шредингера [гл. 19, уравнение (1)]

$$\mathcal{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

при гармонической зависимости от времени  $\exp[-iEt/\hbar]$  [гл. 19, уравнение (6)] приводит к уравнению

$$\mathcal{H}\psi = E\psi. \quad (2)$$

Если в гамильтониан  $\mathcal{H}$  входят кинетическая энергия и одномерный потенциал  $V(x)$ , то мы получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (3)$$

Это уравнение можно представить в более удобной форме

$$\psi'' + [\varepsilon - U(x)]\psi = 0, \quad (4)$$

если ввести следующие определения приведенного потенциала  $U(x)$  и приведенной кинетической энергии  $\varepsilon$ :

$$V = \frac{\hbar^2}{2m} U, \quad (5a)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon. \quad (5b)$$

В некоторых задачах встречается потенциал, постоянный в пределах определенной области пространства, например, в виде прямоугольной потенциальной ямы, а в некоторых случаях потенциал явно зависит от координат, как в случае гармонического осциллятора  $\frac{1}{2}kx^2$ . Основное внимание в данной главе будет уделяться решению уравнения Шредингера (4) для различных типов потенциала  $V(x)$ . Рассмотрим решения, отвечающие как стоячим, так и бегущим волнам, при условии, что полная энергия  $E$  превышает потенциальную энергию  $U(x)$ .

$$\psi(x) = Ae^{ikx - i\omega t} + Be^{-ikx - i\omega t} \quad \text{бегущая волна} \quad (6)$$

$$\psi(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx), \quad \left. \begin{array}{l} \psi(x) = F \sin(kx + \varphi) \end{array} \right\} \quad (7)$$

$$\psi(x) = F \sin(kx + \varphi) \quad \left. \begin{array}{l} \text{стоячая волна} \end{array} \right\} \quad (8)$$

Решение в виде бегущей волны (6) отвечает ситуации, когда частица не локализована в ограниченной области пространства и может двигаться вправо или влево; решения в виде стоячей волны (7) или (8) соответствуют случаю, когда частица не может выходить за пределы ограниченной области пространства. Решения (7) и (8) эквивалентны друг другу при  $C = F \cos \varphi$  и  $D = F \sin \varphi$ . Коэффициенты  $A, B, C, D, F$  и угол  $\varphi$  определяются из условия, что волновая функция и ее первая производная (или, эквивалентно, логарифмическая производная  $\psi'/\psi$  волновой функции) непрерывны в точках  $x$ , где потенциал изменяется скачком.

Если полная энергия  $E$  меньше потенциальной энергии частицы, то возникают экспоненциально растущие или затухающие решения

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad (9)$$

или, эквивалентно,

$$\psi(x) = c \operatorname{sh}(\kappa x) + D \operatorname{ch}(\kappa x). \quad (10)$$

Такие решения описывают проникновение частицы в классически недоступную область.

Если потенциал  $U(x) = 0$ , то частица свободна, и решением уравнения (6) служит плоская волна, распространяющаяся вправо (11) или влево (12):

$$\psi(x) = e^{ikx - i\omega t}, \quad (11)$$

$$\psi(x) = e^{-ikx - i\omega t}. \quad (12)$$

Полная энергия частицы в этом случае совпадает с кинетической энергией

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (13)$$

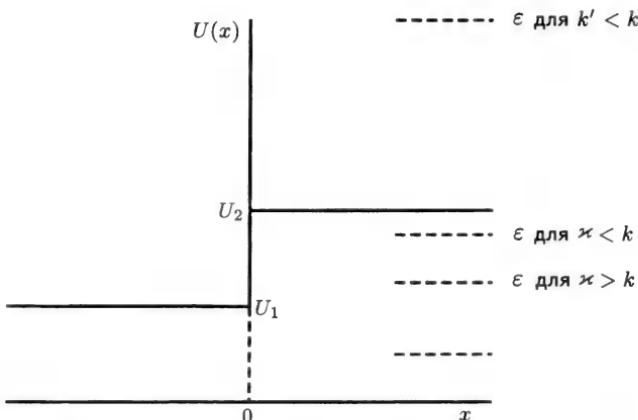
причем импульс  $\mathbf{p}$  частицы определяется как

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}, \quad (14)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновое число, величина которого  $k = 2\pi/\lambda$ .

### 3. ОТРАЖЕНИЕ ОТ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ СТЕНКИ

Рассмотрим ситуацию, в которой приведенный потенциал имеет положительное значение  $U_1$  в области  $x < 0$  и положительное значение  $U_2$  в области  $x > 0$ , причем  $U_1 < U_2$ , как показано на рис. 20.1. При  $\varepsilon < U_1$  не существует решений, имеющих физический смысл,



**Рис. 20.1.** Скачок приведенного потенциала от значения  $U_1$  при  $x < 0$  до значения  $U_2$  при  $x > 0$ . Пунктирными линиями изображены различные значения полной энергии частицы.

поскольку кинетическая энергия не может быть отрицательной. Таким образом, можно рассмотреть только два случая, когда приведенная кинетическая энергия  $\varepsilon$  имеет промежуточное значение между  $U_1$  и  $U_2$  и когда  $\varepsilon$  больше  $U_2$ . Первый случай рассматривается в данном разделе, а второй — в следующем.

При  $U_1 < \varepsilon < U_2$  волновая функция в области  $x < 0$  представляет собой суперпозицию падающей волны  $Ie^{ikx}$  и отраженной волны  $Re^{-ikx}$ , а в классически недоступной области справа волновая функция экспоненциально затухает как  $De^{-\kappa x}$ :

$$\psi(x) = Ie^{ikx} + Re^{-ikx} \quad x < 0, \quad (15a)$$

$$\psi(x) = De^{-\kappa x} \quad x > 0. \quad (15b)$$

Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  в точке  $x = 0$  находим

$$\begin{aligned} I + R &= D, \\ ik(I - R) &= -\kappa D. \end{aligned} \quad (16)$$

Выразив коэффициенты  $R$  и  $D$  через  $I$ , получим

$$R = \frac{ik + \kappa}{ik - \kappa} I, \quad (17)$$

$$D = \frac{2ik}{ik - \kappa} I. \quad (18)$$

Соотношение (17) показывает, что отраженная волна имеет ту же амплитуду  $I$ , что и падающая волна, но другую фазу.

Для определения длины волны в области слева от потенциальной стенки подставим волновую функцию (15a) в уравнение Шредингера (4), что дает

$$k^2 - \varepsilon - U_1 = (2\pi/\lambda)^2, \quad (19)$$

отсюда для длины волны слева от стенки получим

$$\lambda = \frac{2\pi}{(\varepsilon - U_1)^{1/2}}. \quad (20)$$

Таким образом, в области потенциала  $U_1$  длина волны возрастает.

Для определения коэффициента затухания  $\kappa$  в области  $x > 0$  поставим волновую функцию (15b) в уравнение (4):

$$\kappa = (U_2 - \varepsilon)^{1/2}, \quad (21)$$

причем величина  $1/\kappa$  представляет собой расстояние, на котором амплитуда в классически недоступной области спадает в  $e$  раз по сравнению со значением в точке  $x = 0$ . Из соотношения (18) видно, что при  $\kappa \gg k$  амплитуда  $D$  волновой функции быстро спадает по величине в классически недоступной области. Напротив, при

$\hbar \ll k$  амплитуда волновой функции спадает очень медленно, оставаясь большой по величине далеко вглубь классически недоступной области. Оба случая иллюстрируются на рис. 20.2.

#### 4. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ НАД ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ СТЕНКОЙ

Рассмотрим теперь ситуацию, когда полная энергия частицы больше обоих потенциалов, т. е.  $U_1 < U_2 < \varepsilon$ . Как и прежде, слева от стенки наряду с падающей волной будет существовать отраженная волна с коэффициентом отражения  $R/I$ ; справа же — прошедшая волна с коэффициентом прохождения  $T/I$ :

$$\psi(x) = Ie^{ik_1 x} + Re^{-ik_1 x} \quad x < 0, \quad (22a)$$

$$\psi(x) = Te^{ik_2 x} \quad x > 0. \quad (22b)$$

Волновые числа находятся из (19):

$$k_1 = (\varepsilon - U_1)^{1/2} \quad k_2 = (\varepsilon - U_2)^{1/2}, \quad (23)$$

причем поскольку в рассматриваемом случае  $U_1 < U_2$ , то  $k_1 > k_2$  и  $\lambda_1 < \lambda_2$ . Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  в точке  $x = 0$

$$\begin{aligned} I + R &= T, \\ ik_1(I - R) &= ik_2 T. \end{aligned} \quad (24)$$

Выразив коэффициенты  $R$  и  $D$  через  $I$ , получим

$$R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} I, \quad (25a)$$

$$T = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} I. \quad (25b)$$

Прохождение частицы над потенциальной стенкой ( $U_2 < \varepsilon$ ) иллюстрируется на рис. 20.2,в. Из рисунка видно, что амплитуда прошедшей волны меньше, а длина волны — больше, чем у падающей волны, поскольку часть энергии уносится отраженной волной.

Квадраты коэффициента  $I$ ,  $R$  и  $T$  определяют плотность вероятности, отвечающей каждой из волн; при умножении на соответствующие значения скоростей волн получается соотношение для баланса потока вероятности

$$v_1 I^2 - v_1 R^2 = v_2 T^2, \quad (26)$$

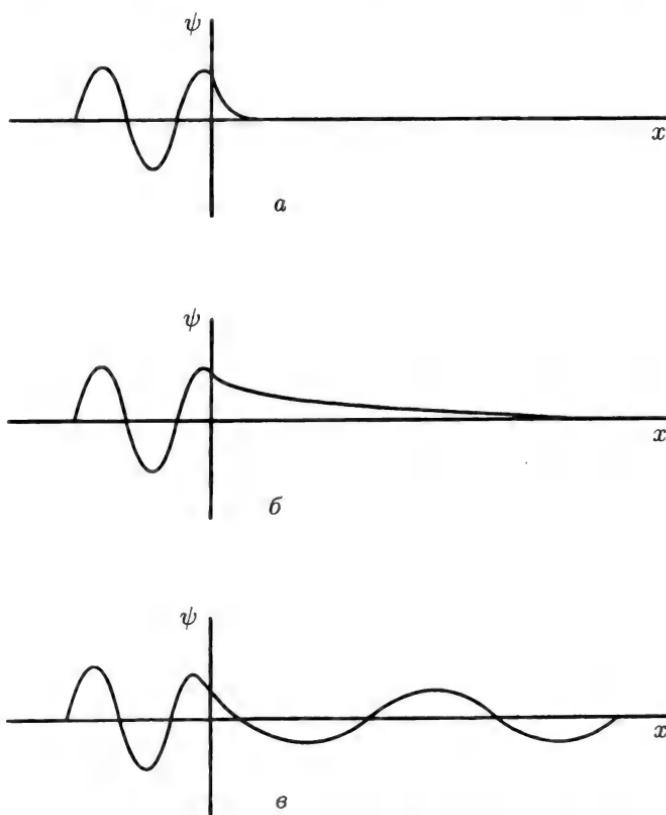


Рис. 20.2. Схематическое изображение волновых функций в окрестности потенциальной стенки на рис. 20.1 при энергиях частицы  $\epsilon > U_1$ . Решения уравнения Шредингера представляют собой волну, распространяющуюся влево от стенки ( $x < 0$ ), а вправо от стенки ( $x > 0$ ) — затухающую экспоненту  $e^{-\kappa x}$  [(a) и (б)], либо волну  $\sin kx$ . Эти случаи отвечают значениям полной энергии  $\epsilon$ , близким к  $U_1$  (a), значениям полной энергии  $\epsilon$  в интервале между  $U_1$  и  $U_2$  (б) и значениям  $\epsilon$  больше  $U_2$  (в), соответственно.

что приводит к соотношению

$$I^2 = R^2 + (k_2/k_1)T^2, \quad (27)$$

поскольку величина скорости дается выражением

$$v_i = p_i/m = \hbar k_i/m, \quad (28)$$

вытекающим из соотношения (14).

## 5. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Рассмотрим ситуацию, в которой волна падает на барьер высотой  $U_0 > 0$  слева от области с  $U_1 = 0$ , и, проходя через барьер, уходит вправо в область с  $U_2 = 0$ . Барьер изображен на рис. 20.3 и расположен в интервале  $-\frac{1}{2}L < x < +\frac{1}{2}L$ . Рассмотрим два случая, в которых полная энергия частицы будет меньше и больше высоты барьера  $U_0$ . В первом случае возникают экспоненциально затухающие решения внутри барьера, а во втором — решения, отвечающие бегущей над барьером волне. В обоих случаях существует волна, проходящая над или под барьером и уходящая вправо в область с нулевым потенциалом. Волновые функции слева и справа от барьера имеют вид

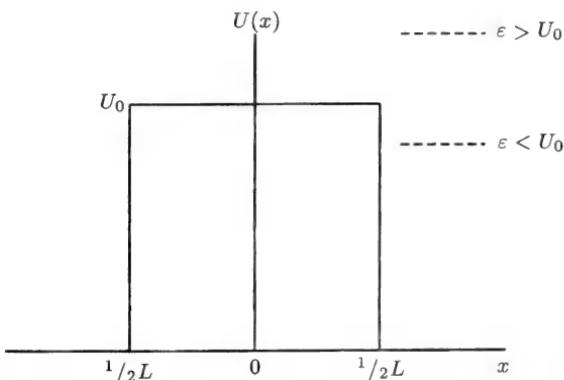
$$\psi(x) = I e^{ik_1 x} + E e^{-ik_1 x} \quad x < -\frac{1}{2}L, \quad (29)$$

$$\psi(x) = T e^{ik_1 x} \quad x > \frac{1}{2}L. \quad (30)$$

В области потенциального барьера возможны два варианта:

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x} \quad \varepsilon < U_0, \quad (31)$$

$$\psi(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx} \quad \varepsilon > U_0, \quad (32)$$



**Рис. 20.3.** Потенциальный барьер высотой  $U_0$ , расположенный в интервале  $-\frac{1}{2}L < x < +\frac{1}{2}L$ . Прохождению над барьером ( $\varepsilon > U_0$ ) отвечает бегущая волна, а прохождению под барьером ( $\varepsilon < U_0$ ) — экспоненциально затухающая волна.

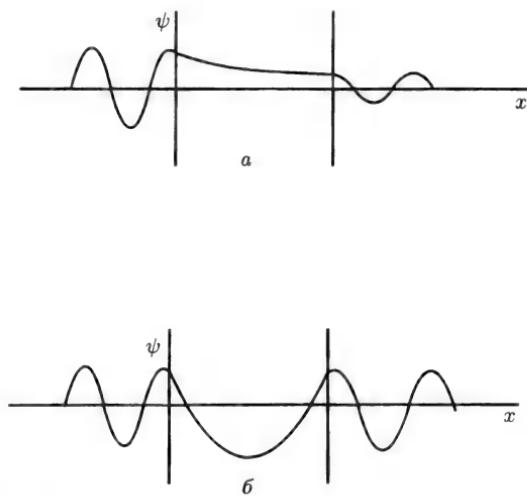


Рис. 20.4. Поведение волновой функции в области потенциального барьера на рис. 20.3: экспоненциальное затухание при  $\varepsilon < U_0$  (а) и бегущая волна при  $\varepsilon > U_0$  (б).

где

$$\kappa = (U_0 - \varepsilon)^{1/2}, \quad (33)$$

$$k = (\varepsilon - U_0)^{1/2}. \quad (34)$$

Волновые функции для случаев  $\varepsilon < U_0$  и  $\varepsilon > U_0$  изображены на рис. 20.4. Требование непрерывности логарифмической производной волновой функции позволяет определить коэффициент прохождения  $T$ . (A. Messiah, Méchanique Quantique, Dunod, Paris, 1964, vol. 1, p. 82)

$$T^2 = \frac{\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{\varepsilon(U_0 - \varepsilon) + \frac{1}{4}U_0^2 \operatorname{sh}^2 \kappa L} \quad \varepsilon < U_0, \quad (35)$$

$$T^2 = \frac{\varepsilon(\varepsilon - U_0)}{\varepsilon(\varepsilon - U_0) + \frac{1}{4}U_0^2 \sin^2 kL} \quad \varepsilon > U_0. \quad (36)$$

На рис. 20.5 показана зависимость  $T^2$  от отношения  $\varepsilon/U_0$  при условии, что  $U_0 L = 40$ . Осцилляции возникают при  $\varepsilon > U_0$ , поскольку  $T^2 = 1$  всякий раз, когда  $kL = n\pi$  при целом  $n$  [см. (36)]. Пунктирная линия отвечает выражению (36), в котором  $\sin kL = 1$ ; она показывает положение локальных минимумов коэффициента про-

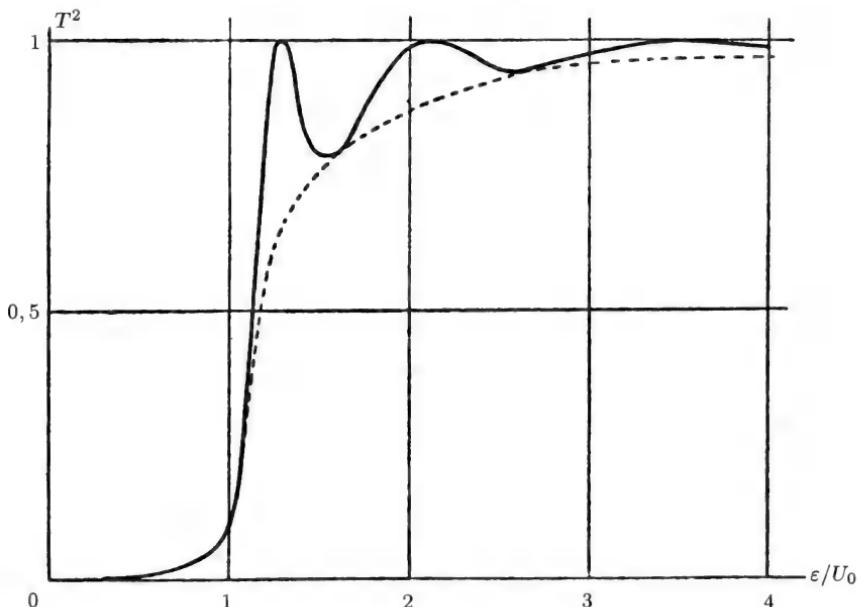


Рис. 20.5. Коэффициент прохождения  $T^2$  через потенциальный барьер, изображенный на рис. 20.3 в функции отношения энергий  $\epsilon/U_0$ . Максимального значения  $T^2 = 1$  коэффициент прохождения достигает при  $kL = n\pi$ . Пунктирная кривая проведена через последовательные минимумы кривой  $T(\epsilon)$ , расположенные в точках  $kL = (n + \frac{1}{2})\pi$ . (Из книги: A. Messiah, Méchanique Quantique, Dunod, Paris, 1964, vol. 1, p. 82.)

хождения  $T$  и отвечает его реальным значениям только в этих минимумах.

## 6. ПРЯМОУГОЛЬНАЯ ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА

Рассмотрим прямоугольную потенциальную яму шириной  $a$  и глубиной  $V_0$ . За начало отсчета энергии удобно выбрать дно ямы, а за начало отсчета координат — ее центр, как показано на рис. 20.6. Нас интересуют решения с энергиями  $E < V_0$ , расположенными ниже верхнего края ямы; эти решения имеют вид стоячих волн внутри ямы и затухающих экспонент вне ее. Решение данной задачи вполне аналогично решению задачи о потенциальном барьере в разд. 4 гл. 19 с той, однако, разницей, что теперь за начало отсчета энергии

выбрано дно. В частности, в данном случае

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} \quad x < -\frac{1}{2}a, \quad (37a)$$

$$\psi(x) = B \sin(kx) + C \cos(kx) \quad -\frac{1}{2}a < x < +\frac{1}{2}a, \quad (37b)$$

$$\psi(x) = De^{-\kappa x} \quad +\frac{1}{2}a < x, \quad (37c)$$

$$k = (\varepsilon)^{1/2}, \quad (38a)$$

$$\kappa = (U_0 - \varepsilon)^{1/2}, \quad (38b)$$

где  $U_0$  и  $\varepsilon$  выражены через  $V_0$  и  $E$  [соотношение (5)]. Для решения внутри ямы вида  $\psi = \sin(kx)$  граничные условия приводят к выражению

$$k \operatorname{ctg} \left( \frac{1}{2}ka \right) = -\kappa \quad \text{отрицательная четность}, \quad (39a)$$

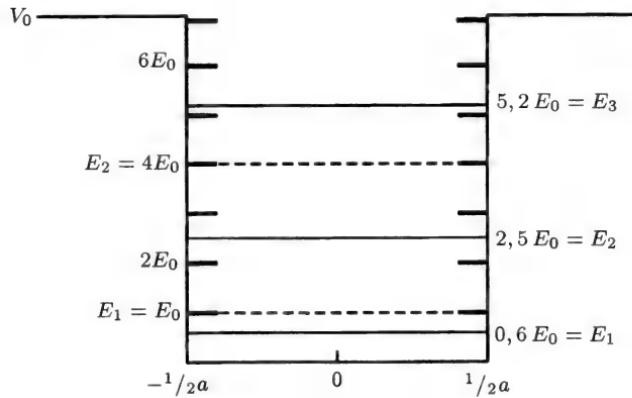
а для решений вида  $\psi = \cos(kx)$  — к условию

$$k \operatorname{tg} \left( \frac{1}{2}ka \right) = \kappa \quad \text{положительная четность}. \quad (39b)$$

В общем случае эти трансцендентные уравнения нельзя решить аналитически.

Чтобы найти решение графическим методом, введем угол  $\mathcal{E}$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}ak = \frac{1}{2}a(\varepsilon)^{1/2}, \quad (40)$$



**Рис. 20.6.** Одномерная потенциальная яма; уровни энергии  $E_n$  в яме конечной глубины (показаны сплошными линиями, значения энергий приведены справа) лежат ниже аналогичных уровней в яме с бесконечно высокими стенками (показаны пунктиром, значения энергий приведены слева).

что позволяет с помощью (38б) получить

$$\frac{1}{2}a\varkappa = \left[ \left( \frac{1}{2}a^2 \right) U_0 - \mathcal{E}^2 \right]^{1/2} \quad (41)$$

и привести оба уравнения к виду

$$-\mathcal{E} \operatorname{ctg} \mathcal{E} = \left[ \left( \frac{1}{2}a \right)^2 U_0 - \mathcal{E}^2 \right]^{1/2} \text{ отрицательная четность,} \quad (42a)$$

$$\mathcal{E} \operatorname{tg} \varepsilon = \left[ \left( \frac{1}{2}a \right)^2 U_0 - \mathcal{E}^2 \right]^{1/2} \text{ положительная четность.} \quad (42b)$$

Решения  $\mathcal{E}$  соответствуют точкам пересечения графиков функций

$$r(\mathcal{E}) = -\mathcal{E} \operatorname{ctg} \mathcal{E} \quad \text{отрицательная четность,} \quad (43a)$$

$$p(\mathcal{E}) = \mathcal{E} \operatorname{tg} \varepsilon \quad \text{положительная четность} \quad (43b)$$

с графиком функции

$$q(\mathcal{E}) = \left[ \left( \frac{1}{2}a \right)^2 U_0 - \mathcal{E}^2 \right]^{1/2}; \quad (44)$$

рис. 20.7 иллюстрирует графический метод. Соотношение (44), переписанное в форме

$$q^2 + \mathcal{E}^2 = \left( \frac{1}{2}a \right)^2 U_0, \quad (45)$$

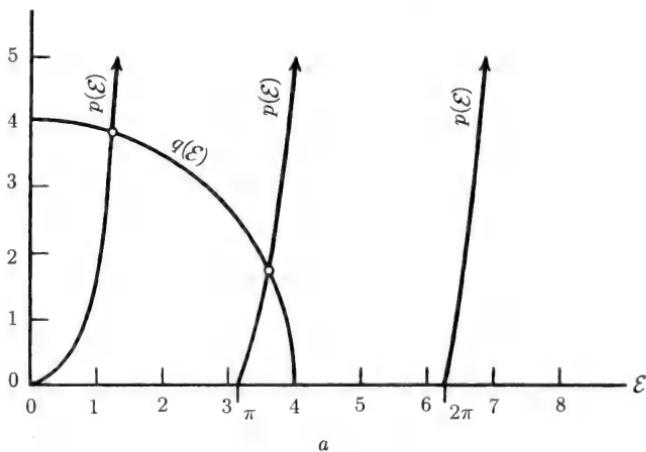
представляет собой уравнение окружности с радиусом

$$\frac{1}{2}a\sqrt{U_0} \quad (46)$$

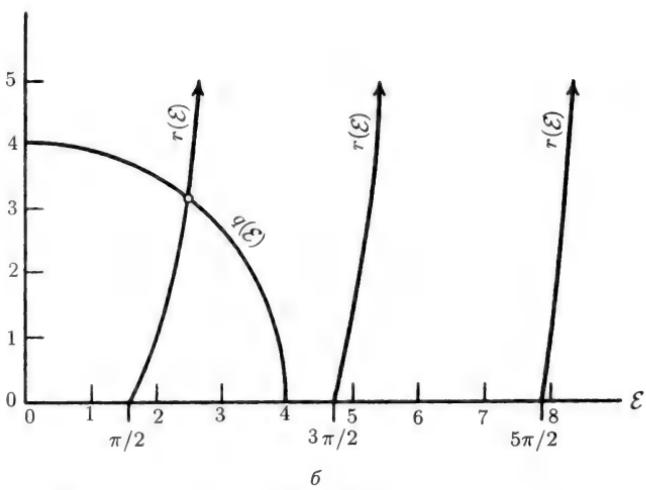
в плоскости  $q — \mathcal{E}$ , как показано на рис. 20.7. Чтобы найти значение энергии, величину  $\varepsilon$  в (5) следует выразить через найденное решение  $\mathcal{E}$  уравнения (42) с помощью соотношения (40)

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (2\mathcal{E})^2. \quad (47)$$

Из рис. 20.7 видно, что 1) в одномерной яме всегда существует по крайней мере один уровень энергии; 2) низший уровень энергии отвечает четной волновой функции; 3) четные и нечетные состояния чередуются по энергии; 4) при заданном значении величины  $U_0a^2$  существует только конечное число четных и нечетных состояний. Число энергетических уровней увеличивается с ростом  $U_0a^2$ , поскольку из соотношения (47) видно, что при увеличении ширины ямы  $a$  расстояние между соседними уровнями уменьшается, а согласно (46) и рис. 20.7 с увеличением  $U_0$  растет диапазон разрешенных значений энергии. Таким образом, безразмерный параметр  $U_0a^2$  можно рассматривать в качестве характеристики ямы. При



a



б

Рис. 20.7. Графики функций (43a) и (43б) для одномерной прямоугольной потенциальной ямы. Величины  $E$ , определяющие уровни энергии в соотношении (47), находятся по точкам пересечения графика функции (43) с окружностями  $r(E)$ , определяемыми уравнением (45). Показаны два корня  $r(E)$ , отвечающие положительной четности волновой функции, и один корень  $r(E)$ , отвечающий отрицательной четности для окружности  $q(E)$  радиуса  $\frac{1}{2}a\sqrt{U_0} = 4$ . (Из книги: R. M. Eisberg. Fundamentals of Modern Physics, Wiley, New York, 1961, Figs. 8-15 and 8-16.)

радиусе окружности (45)  $\frac{1}{2}a\sqrt{U_0} < \frac{1}{2}\pi$  в яме существует только одно связанное состояние; второе связанное состояние возникает при радиусе  $\frac{1}{2}a\sqrt{U_0} = \frac{1}{2}\pi$ , и соотношение (44) принимает вид

$$q(\mathcal{E}) = \left[ \left( \frac{1}{2}\pi \right)^2 - \mathcal{E}^2 \right]^{1/2}. \quad (48)$$

Как видно из (5a), второй уровень в яме возникает при

$$V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \quad (49)$$

## 7. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА С БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИМИ СТЕНКАМИ

Для решения задачи о потенциальной яме с бесконечно высокими стенками вновь выберем за начало отсчета энергии дно ямы, так что потенциал вне ямы будет принимать бесконечно большие значения. Данная задача аналогична задаче о трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, рассмотренной в разд. 5 гл. 19. Поскольку значение  $\varkappa$  в соотношениях (37a) и (37b) становится бесконечно большим, волновая функция обращается в нуль за пределами ямы. Решение по-прежнему дается выражением (37b), однако граничные условия теперь будут иметь вид

$$\cos(\pm k_n a/2) = 0 \quad k_n = n\pi/a \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad \begin{array}{l} \text{положительная} \\ \text{четность,} \end{array} \quad (50a)$$

$$\sin(\pm k_n a/2) = 0 \quad k_n = n\pi/2 \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad \begin{array}{l} \text{отрицательная} \\ \text{четность.} \end{array} \quad (50b)$$

Таким образом, существует два типа решений — четные и нечетные (рис. 20.8). Обоим типам волновых функций отвечает одно и то же выражение для энергии, но различные значения  $n$ . Поскольку потенциальная энергия в яме равна нулю, энергия частицы является чисто кинетической и определяется равенством (13) при условии (50)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (51)$$

Можно определить так называемую энергию основного состояния  $E_0$  — наименьшую из возможных энергий частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками; эта энергия отвечает ( $n = 1$ ):

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (52)$$

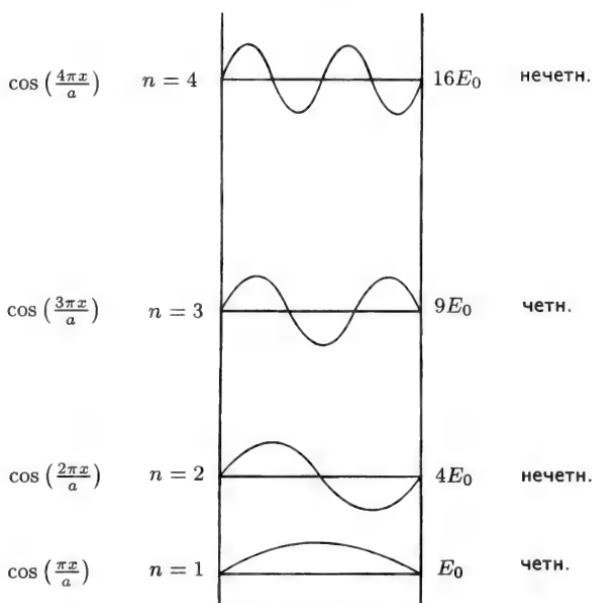


Рис. 20.8. Волновые функции, отвечающие первым четырем уровням энергии ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Энергии первых пяти уровней, выраженные через энергию основного состояния  $E_0$ , таковы:

$$E_1 = E_0, \quad E_2 = 4E_0, \quad E_3 = 9E_0, \quad E_4 = 16E_0, \quad E_5 = 25E_0. \quad (53)$$

нечетн.      четн.      нечетн.      четн.      нечетн.

Четность состояний чередуется, как и в случае потенциальной ямы со стенками конечной высоты. Приведенные значения энергии можно найти с помощью рис. 20.7, если считать, что окружность имеет бесконечно большой радиус. Из рис. 20.6 и 20.7 видно также, что уровни энергии в яме конечной глубины всегда лежат ниже аналогичных уровней в яме с бесконечно высокими стенками.

## СТРОЕНИЕ АТОМА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 19 было найдено решение уравнения Шредингера для атома водорода. В данной главе мы проанализируем это решение и применим его к гелию, а также к значительно более тяжелым атомам. Будет объяснено расщепление уровней, вызываемое спин-орбитальным взаимодействием, и в общих чертах описан подход Хартри–Фока к изучению тяжелых атомов. Обсуждается также периодическая система элементов и то, как зависят энергии и размеры атомов от атомного номера.

### 2. АТОМ ВОДОРОДА

Атом водорода — это атом с зарядом ядра  $+Ze$  ( $Z = 1$ ) и единственным электроном на орбите. Он характеризуется кулоновским потенциалом  $V(\mathbf{r}) = Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$  и описывается уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi = E\psi. \quad (1)$$

В гл. 19 мы записали это уравнение в сферических координатах

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi - \\ - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi = E\psi \quad (2) \end{aligned}$$

и отметили, что в случае сферически симметричного потенциала, аналогичного кулоновскому, в уравнении Шредингера разделяются переменные и его решение имеет вид произведения

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{LM}(\theta, \varphi), \quad (3)$$

где сферическая гармоника  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$  является собственной функцией угловой части лапласиана, а функция  $R(r)$  удовлетворяет следующему радиальному уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right\} \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi. \quad (4)$$

Чтобы решить это однородное дифференциальное уравнение второго порядка, введем безразмерную переменную  $\rho$  и безразмерный энергетический параметр  $n$ :

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}, \quad n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left( \frac{m}{2|E|} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

где  $a_0$  — боровский радиус,

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,0529 \text{ нм} = 0,529 \text{ \AA}. \quad (6)$$

Записав

$$R(r) = e^{-\rho/2} \rho^L L(\rho), \quad (7)$$

получим следующее дифференциальное уравнение для  $L(\rho)$ :

$$\rho L'' + [2(L+1) - \rho] L' + [n - L - 1] L = 0. \quad (8)$$

Сходное уравнение

$$\rho L'' + [m + 1 - \rho] L' + p L = 0 \quad (9)$$

имеет решения в виде присоединенных полиномов Лагерра  $L_p^m(\rho)$  порядка  $p$  и степени  $m$ , где  $p$  и  $m$  — целые числа. Сравнение уравнений (8) и (9) показывает, что радиальная функция (7) атома водорода включает полиномы Лагерра  $L_p^m$  целого порядка  $p = n - L - 1$  и целой степени  $m = 2L + 1$ . Следовательно, полная волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, имеет вид

$$\psi(r, \theta, \varphi) = e^{-\rho/2} \rho^L L_{n-L-1}^{2L+1}(\rho) Y_{LM}(\theta, \varphi). \quad (10)$$

Для атома водорода в основном состоянии  $n = 1$ ,  $L = 0$ , угловая зависимость отсутствует и волновая функция имеет вид

$$\psi(r, \theta, \varphi) = (Z^3/\pi a_0^3)^{1/2} e^{-Zr/a_0}, \quad (11)$$

куда в общем случае входит заряд ядра  $Z$  (для водорода  $Z = 1$ ).

Чтобы получить выражение для энергии, заметим, что в (5) величина  $n$  является целым числом и мы отождествляем его с главным квантовым числом, так что выражение (5) дает известную формулу Ридберга для уровней энергии

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2}, \quad (12)$$

где  $a_0$  дается выражением (6) и в основном состоянии  $E_1 = -13,6$  эВ. Энергия не зависит от орбитального квантового числа  $L$ , и, таким образом, одной и той же энергии может соответствовать несколько значений  $L$ , а именно возможны значения

$$L = 0, 1, 2, \dots, (n - 1). \quad (13)$$

Следовательно, четность не является точным квантовым числом для атома водорода, поскольку четность состояния равна  $(-1)^L$ , и при одном и том же  $n$  возможны как нечетные, так и четные значения  $L$ . Точнее, четырем наименшим значениям  $n$  соответствуют следующие состояния:

$$\begin{aligned} n = 1, & \text{ только s-состояние,} \\ n = 2, & \text{ s- и p-состояния,} \\ n = 3, & \text{ s-, p- и d-состояния,} \\ n = 4, & \text{ s-, p-, d- и f-состояния,} \end{aligned} \quad (14)$$

где  $L = 0, 1, 2, 3$  соответственно для s-, p-, d- и f-состояний. Эти энергетические уровни атома водорода представлены на рис. 21.1

Если воспользоваться безразмерной постоянной тонкой структуры  $\alpha$ ,

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad (15)$$

то для энергий уровней получим следующее выражение:

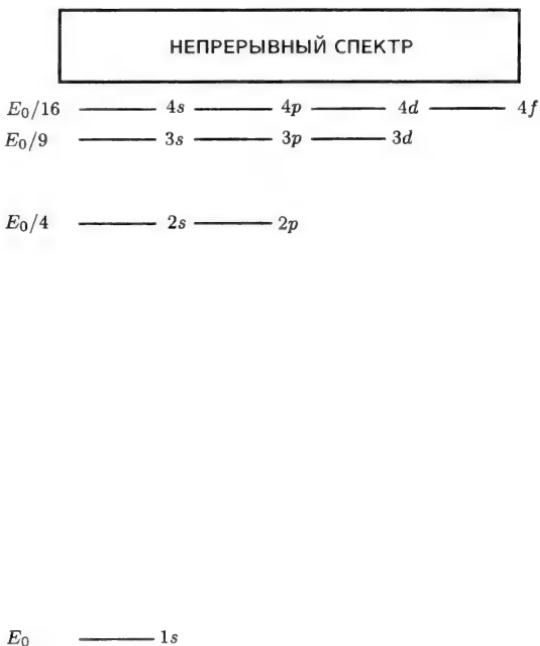
$$E_n = \frac{\frac{1}{2}mc^2\alpha^2}{n^2}, \quad (16)$$

где  $mc^2$  — энергия покоя, а приведенная масса  $m$ ,

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p}, \quad (17)$$

очень близка массе электрона  $m_e$ , поскольку она намного меньше, чем масса протона  $m_p$ ,  $m_p/m_e \approx 1837$ .

Квадрат волновой функции  $|\Psi(\rho, \theta, \varphi)|^2$  пропорционален электронной плотности в точке с координатами  $r, \theta, \varphi$ . Большой интерес представляет определение вероятности найти электрон на некотором расстоянии  $r$  от ядра. Эта вероятность равна  $4\pi r^2[R(r)]^2$ , где  $4\pi r^2 \Delta r$  — объем сферической оболочки толщиной  $\Delta r$  на расстоянии  $r$  от ядра. На рис. 21.2 приведены кривые зависимости величины  $4\pi r^2[R(r)]^2$  от  $r$ , и мы видим, что чем больше главном квантовое число  $n$ , тем дальше от ядра концентрируется электронная плотность. Среднее расстояние  $\langle r \rangle$ , среднеквадратическое расстояние



**Рис. 21.1.** Энергетические уровни атома водорода нулевого порядка  $E_n = E_0/n^2$ .

$[\langle r^2 \rangle]^{1/2}$  и величина  $\langle 1/r \rangle$  зависят от  $n$  и  $L$ , но не от  $M_L$ , следующим образом:

$$\langle r \rangle = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{L(L+1)}{n^2} \right) \right\}, \quad (18)$$

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{3}{2} \left( 1 - \frac{L(L+1) - \frac{1}{3}}{n^2} \right) \right\}^{1/2}, \quad (19)$$

$$\langle 1/r \rangle = Z/a_0 n^2, \quad (20)$$

причем последнее значение не зависит от  $L$ .

Полиномы Лагерра не годятся для описания тяжелых атомов. С другой стороны, сферические гармоники описывают угловую зависимость для атомов любых размеров.

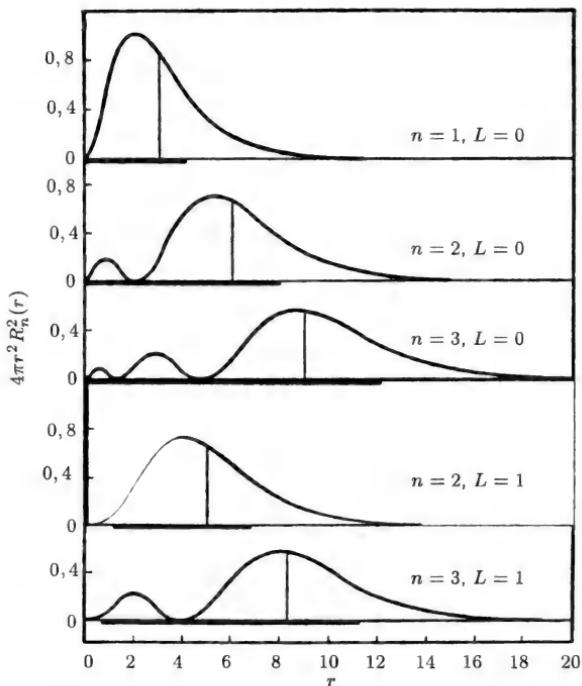


Рис. 21.2. Вероятность  $4\pi r^2 R_n^2(r)$  найти электрон на расстоянии  $r$  от ядра в атоме водорода для пяти волновых функций атома водорода с соответствующими значениями  $n$  и  $L$ .

### 3. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

С учетом спин-орбитального взаимодействия возникает дополнительное расщепление уровней  $\Delta E_{SO}$ :

$$\Delta E_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2} \left( \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \quad (21)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \left( \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right) [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (22)$$

Выход (22) из (21) приведен в разд. 5 гл. 17. Релятивистская теория Дирака дает более точное значение энергии этого расщепления

$$E = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar n)^2} \left\{ 1 + \frac{a^2Z^2}{n} \left( \frac{1}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\}, \quad (23)$$

которое хорошо согласуется с экспериментом. На рис. 21.3 показано спин-орбитальное расщепление низших уровней водорода ( $Z = 1$ ).

#### 4. АТОМ ГЕЛИЯ

Атомный номер атома гелия  $Z = 2$  и координаты двух электронов  $r'$  и  $r''$  соответственно; его гамильтониан  $\mathcal{H}$  в приближенной записи (1) приводит к следующему уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla'^2 + \nabla''^2)\psi - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r'} + \frac{1}{r''} \right) \psi + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \psi = E\psi, \quad (24)$$

где волновая функция  $\psi = \psi(\mathbf{r}', s', \mathbf{r}'', s'')$  зависит от пространственных ( $\mathbf{r}$ ) и спиновых ( $\mathbf{s}$ ) координат двух электронов. Кулоновское

#### НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР

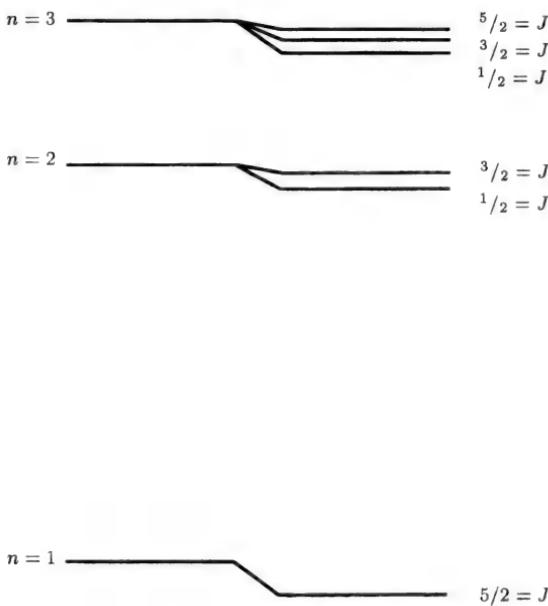


Рис. 21.3. Спин-орбитальное расщепление трех низших ( $n = 1, 2, 3$ ) энергетических уровней атома водорода.

отталкивание двух электронов в случае атома гелия делает решение задачи значительно более трудным, чем для атома водорода. Для тяжелых атомов гамильтониан имеет особенно сложный вид, поскольку он включает отталкивание всех пар электронов.

Спины двух электронов гелия могут быть либо антипараллельны, либо параллельны, так что возможны как синглетные, так и триплетные состояния, причем переходы между этими наборами состояний запрещены. Атомы гелия в синглетных состояниях называются парагелием, а в триплетных состояниях — ортогелием.

В первом приближении можно предположить, что волновая функция гелия представляет собой произведение двух волновых функций атома водорода [выражение (10)], соответствующих каждому из электронов. Иными словами, волновая функция основного состояния гелия будет произведением двух волновых функций водорода в основном состоянии (11) с  $Z = 2$ :

$$\psi_0(r', r'') = (Z^3/\pi a_0^3) e^{-Z(r'+r'')/a_0}. \quad (25)$$

Если в уравнении (24) в нулевом приближении пренебречь членом с  $e^2/4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|$ , учитывающим взаимодействие электронов, то это уравнение можно переписать в виде двух несвязанных уравнений:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r'}\right)\psi - \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla''^2 + \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r''}\right)\psi = E_0\psi, \quad (26)$$

каждому из которых согласно (12) соответствует собственное значение энергии  $-13,6Z^2 = 54,4$  эВ, что в нулевом приближении дает для энергии основного состояния

$$E_0 = -108,8 \text{ эВ}. \quad (27)$$

Поправка первого порядка к энергии  $E_1$  получается посредством вычисления интеграла, учитывающего межэлектронное взаимодействие:

$$E_1 = \int |\psi_0(r', r'')|^2 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} d^3r' d^3r'' = \frac{5}{4} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = \left(\frac{5}{2}\right) 13,6 \text{ эВ} = 34,0 \text{ эВ}. \quad (28)$$

Таким образом, полная энергия с точностью первого порядка есть

$$E = E_0 + E_1 = -108,8 \text{ эВ} + 34,0 \text{ эВ} = -74,8 \text{ эВ}, \quad (29)$$

что близко к экспериментальному значению  $-78,6$  эВ.

Полная волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки электронов; иными словами, при взаимном обмене двух электронов она должна менять знак:

$$\psi(r's', r''s'') = -\psi(r''s'', r's'). \quad (30)$$

Пространственная волновая функция основного состояния [выражение (25)] при  $n' = 1, L' = 0$  для первого электрона и  $n'' = 1, L'' = 0$  для второго электрона при отсутствии нормировки имеет вид

$$\psi_0(r', r'') = e^{-2(r'+r'')/a_0} = \phi_{1s}(r')\phi_{1s}(r''), \quad (31)$$

т. е. симметрична относительно перестановки пространственных координат  $r'$  и  $r''$ . Отсюда следует, что спиновая часть волновой функции должна быть антисимметричной, т. е. синглетной:

$$\psi_{\text{спин}} = (\alpha' \beta'' - \beta' \alpha'')/\sqrt{2}, \quad (32)$$

где  $\alpha$  обозначает состояние со спином, направленным вверх, а  $\beta$  — со спином, направленным вниз.

Следующее более высокое энергетическое состояние отвечает  $n' = 1, n'' = 2$ , что соответствует возможным уровням  $n' = 1, L' = 0$  для первого электрона и либо  $n'' = 2, L'' = 0$ , либо  $n'' = 2, L'' = 1$  для второго электрона. В этих случаях пространственные волновые функции могут быть записаны либо в симметричной, либо в антисимметричной форме, если выбрать соответственно знаки плюс или минус в выражении

$$\psi(r', r'') = [\phi_{1s}(r')\phi_{2s}(r'') \pm \phi_{1s}(r'')\phi_{2s}(r')]/\sqrt{2}. \quad (33)$$

В результате спиновая часть волновой функции может быть либо антисимметричным синглетом (32), либо симметричным триплетом

$$\psi_{\text{спин}} = \begin{cases} \alpha' \alpha'', & M_s = -1, \\ (\alpha' \beta'' + \beta' \alpha'')/\sqrt{2}, & M_s = 0, \\ \beta' \beta'', & M_s = +1, \end{cases} \quad (34)$$

которые выбираются таким образом, чтобы полная волновая функция была антисимметричной.

Другой подход к вычислению энергии атома гелия — это вариационный метод, в котором волновая функция записывается как функция одного или более параметров  $\xi_i$ , а затем среднее значение полного гамильтониана  $\langle \psi(\xi_i) | \mathcal{H} | \psi(\xi_i) \rangle = E(\xi_i)$  минимизируется по этим параметрам. Согласно вариационной теореме, энергия  $E(\xi_i)$  всегда будет выше истинной энергии  $E_{\text{ист}}$ , но при удачном выборе параметров будет близка к  $E_{\text{ист}}$ . Чтобы учесть частичное экранирование другим электроном полного ядерного заряда  $2e$ , в волновой функции (25) атомный номер можно заменить эффективным зарядом  $Z_{\text{эфф}} = Z - \sigma$ , где  $Z = 2$  для гелия, а  $\sigma$  — параметр. Вычисление среднего значения  $\langle \psi(\sigma) | \mathcal{H} | \psi(\sigma) \rangle$  полного гамильтониана (24) дает

$$E(\sigma) = -[Z^2 - \left(\frac{5}{8}\right)Z + \left(\frac{5}{8}\right)\sigma - \sigma^2] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}; \quad (35)$$

это выражение имеет минимум при  $\sigma = 5/16$ , и мы получаем энергию

$$E\left(\frac{5}{16}\right) = -\left[Z - \left(\frac{5}{16}\right)\right]^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = -(729 \times 13,6/128) = -77,4 \text{ эВ.} \quad (36)$$

Это значение ближе к экспериментальному значению  $-78,6$  эВ, чем полученное по теории возмущений первого порядка значение (29). Использование пробных волновых функций с дополнительными параметрами позволяет получить энергии, более близкие к экспериментальным значениям. Этот вариационный метод применим и к более тяжелым атомам.

## 5. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ И РАЗМЕРЫ АТОМОВ

Периодическая система элементов (рис. 21.4) построена в соответствии с модифицированной схемой энергетических уровней атома водорода, представленной на рис. 21.5. В этой модифицированной схеме d- и f-уровни перемещены вверх для объединения в группы с более высокими главными квантовыми числами  $n$ . Периодическая система строится посредством постепенного заполнения один за другим модифицированных уровней, и магическим числом  $n = 2, 10, 18, 36, 54$  и  $86$ , когда все уровни в группе оказываются полностью занятыми, соответствуют инертные газы. Обычно новые элементы получаются в результате добавления электронов к s-состояниям ( $L = 0$ ) и p-состояниям ( $L = 1$ ). При заполнении d-уровней ( $L = 2$ ) образуются три ряда переходных элементов, а при заполнении f-уровней ( $L = 3$ ) возникает два длинных периода периодической системы, содержащие атомы редкоземельных элементов и актинидов.

Размеры атомов растут с атомным номером и, кроме того, они меняются систематически от группы к группе, как показано в табл. 21.1. Значения атомных радиусов в таблице определены по известным плотностям и структуре твердых тел, состоящих из атомов только одного сорта. Мы видим, что для большинства атомов диаметры кристаллов составляют 4–8 боровских радиусов, или 0,2–0,4 нм. Эти диаметры были определены исходя из плотности твердых тел. Атомы щелочных и щелочноземельных металлов, а также благородных металлов имеют большие радиусы, а размеры атомов, располагающихся в средних группах таблицы, отмеченных римскими цифрами III, IV, V и VI, меньше. Внизу таблицы представлены элементы переходных рядов, размеры этих атомов практически одинаковы и незначительно изменяются в зависимости от  $Z$  и от группы к группе.

Group IA IIA		Группа Новое обозначение ЮПАК														Group IIIB IIIA		Group IVB IVA		Group Vb VA		Group VIB VIA		Group VIIIB VIIIA		Orbit
1 +1 H -1 1.00794 1																						2 0 He 4.020602 2	K			
3 +1 Li 6.941 2-1	4 +2 Be 9.012182 2-2															5 +2 Sn +4 118.71 18 18 4	6 +2 C -4	7 +1 N +3 +4 +5 +6 +7 +8 +9 +10	8 -1 O -2	9 -1 F -1	10 0 Ne 0					
11 +1 Na 22.989768 2-8-1	12 +2 Mg 24.3050 2-8-2															10.811 2-3	12.011 2-4	14.00674 2-5	15.9994 2-6	18.9984032 2-7	20.1797 2-8		K-L			
19 +1 K 39.0983 8-8-1	20 +2 Ca 40.078 8-8-2															13 +3 Al 26.981539 2-8-3	14 +2 Si -4	15 +3 P +5 -3	16 +4 S +6 -2	17 +1 Cl +5 +7	18 0 Ar 32.066 2-8-6					
37 +1 Rb 85.4678 18-8-1	38 +2 Sr 87.62 18-8-2															35 +1 Br +5 -1	36 0 Kr 33.4527 2-8-7	39.948 2-8-8				K-L-M				
55 +1 Cs 132.9054 -18-8-1	56 +2 Ba 137.327 -18-8-2															34 +4 As +5 -3	35 +1 Se +6 -2	36 0 Kr 52 +4 Sb +5 -3	53 +1 Te +6 -2	54 0 Xe +5 +7						
87 +1 Fr 88 +2 Ra (223) -18-8-1	89** +3 Ac +3 Ra 226.025 -18-8-2															51 +2 In 127.60 -18-8-6	52 +4 Sn +6 -3	53 +1 Sb +5 -2	54 0 Xe 126.90447 -18-8-7	55 131.29 -18-8-8		M-N-O				
• Лантиниоиды		58 +3 Ce +4 140.115 -20-8-2	59 +3 Pr +4 140.90765 -21-8-2	60 +3 Nd +4 144.24 -22-8-2	61 +3 Pm +4 (145)	62 +2 Sm +3 150.36 -23-8-2	63 +2 Eu +3 151.965 -24-8-2	64 +3 Gd +4 157.25 -25-8-2	65 +3 Tb +4 158.9234 -27-8-2	66 +3 Dy +4 162.50 -28-8-2	67 +3 Ho +4 164.93032 -29-8-2	68 +3 Er +4 167.26 -30-8-2	69 +3 Tm +4 168.93421 -31-8-2	70 +3 Yb +4 173.04 -32-8-2	71 +3 Lu +4 174.967 -32-9-2							N O P				
** Актиниоиды		90 +4 Th -18-10-2	91 +5 Pa +4 232.0381 -20-9-2	92 +3 U +4 231.03588 -21-9-2	93 +3 Np +4 238.0289 -22-9-2	94 +3 Pu +4 237.048 -24-8-2	95 +3 Am +4 244 -25-8-2	96 +3 Cm +4 243 -25-9-2	97 +3 Bk +4 247 -27-8-2	98 +3 Cf +4 247 -28-8-2	99 +3 Es +4 251 -29-8-2	100 +3 Fm +4 252 -30-8-2	101 +2 Md +3 257 -31-8-2	102 +2 Lr +3 258 -32-8-2	103 +3 102.9 -32-9-2							O P Q				

Рис. 21.4. Периодическая система элементов. (Из книги: Chemical and Engineering News 63, 1985, p. 27; см. также Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press.)

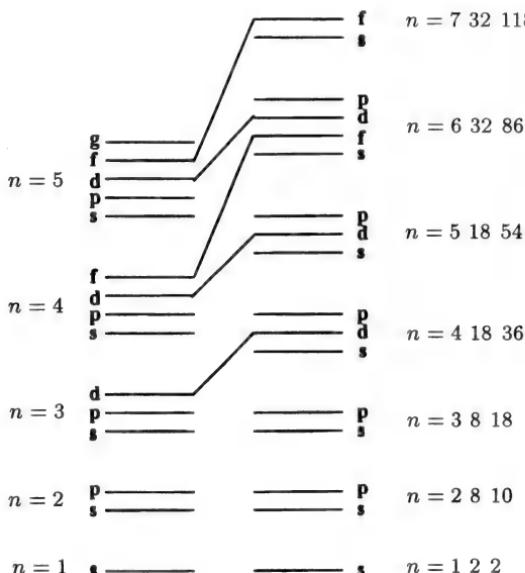


Рис. 21.5. Сдвиг энергетических уровней (слева) в положения, которые они занимают в тяжелых атомах (справа). Показан порядок заполнения уровней при построении периодической системы. Числа двух последних столбцов справа представляют собой соответственно число электронов на уровнях с различными  $n$  и суммарное число, отвечающее заполнению каждой оболочки  $n$ . Числа 2, 10, 18, 36, ..., отвечающие заполненным оболочкам — магические числа.

В химических соединениях атомы притягиваются друг к другу и располагаются ближе, чем можно было ожидать из их кристаллических радиусов. В соединениях с ионной связью положительные ионы, называемые катионами, теряют валентные электроны и, следовательно, их размеры существенно уменьшаются. Это можно видеть из сравнения кристаллических радиусов в табл. 21.1 с радиусами ионов в табл. 21.2 для одних и тех же элементов. Например, кристаллический радиус атома натрия равен  $3,66\text{\AA}$ , в то время как радиус иона  $\text{Na}^+$  составляет только  $0,97\text{\AA}$ . Размеры отрицательных ионов, называемых анионами, которые при образовании ионной связи приобретают электроны, уменьшаются не так значительно. Например кристаллический радиус селена равен  $2,32\text{\AA}$ , а ионный радиус аниона  $\text{Se}^{2-}$  равен  $1,91\text{\AA}$ . Некоторые атомы имеют несколько валентных состояний с постепенно уменьшающимися радиуса-

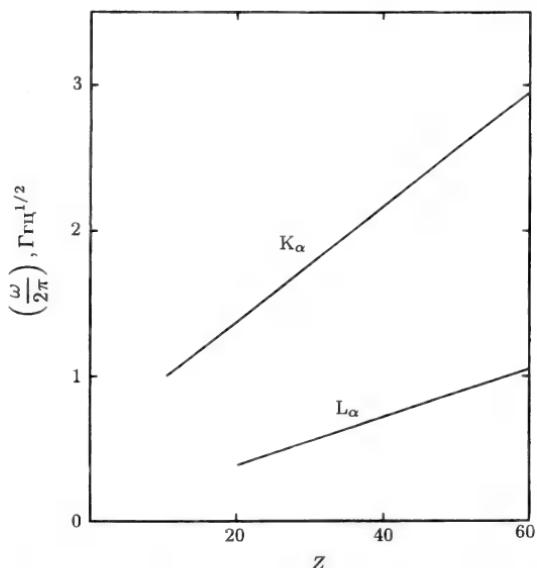


Рис. 21.6. Закон Мозли, демонстрирующий наличие линейной зависимости корня квадратного из частоты рентгеновских  $K_{\alpha}$ - и  $L_{\alpha}$ -линий от атомного номера для элементов с  $Z = 15 - 60$ .

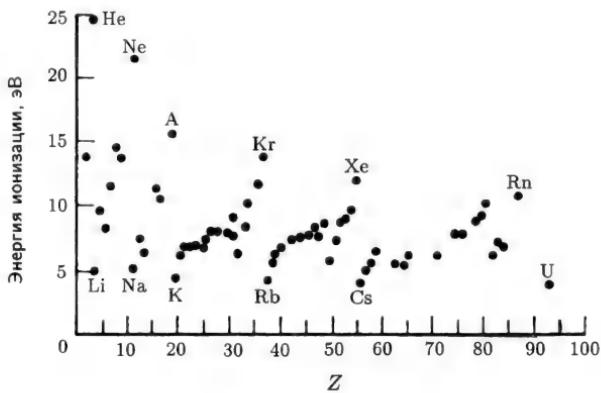


Рис. 21.7. Энергии ионизации внешнего электрона различных элементов. (Из книги: Eisberg, Resnick, Quantum Physics, Wiley, New York, 1974, p. 364.)

ми, такие, как марганец, который образует катионы  $Mn^{2+}(0,80)\text{\AA}$ ,  $Mn^{3+}(0,66)\text{\AA}$ ,  $Mn^{4+}(0,60)\text{\AA}$  и редко  $Mn^{7+}(0,46)\text{\AA}$ .

Электронам, наиболее близко расположенным к ядру и принадлежащим К-оболочке, отвечает главное квантовое число  $n = 1$ , и радиус  $r_1$  их электронной орбиты можно оценить из выражения

$$r_1 \approx a_0/Z, \quad (37)$$

полученного на основе (5) с  $\rho = 2$  [см. волновую функцию (7)]. Отсюда для самого тяжелого стабильного элемента Bi ( $Z = 83$ ) находим  $r_1 = 0,00064$  нм, что на два порядка величины меньше радиуса атома водорода и лишь на два порядка величины больше радиуса ядра Bi. Если в выражении (12) положить  $E_1 = \hbar\omega$ , то частота  $\omega$  будет пропорциональна  $Z^2$ , и экспериментально установлено, что

**Таблица 21.1.** Кристаллические радиусы (в ангстремах) или расстояния между соседними атомами в кристаллах одноатомных элементов, расположенных в соответствии с их положением в периодической системе. В верхней части таблицы помещены обычные элементы, а в нижней — три ряда переходных элементов.

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
3,02	2,22		1,54		1,44	3,16	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
3,66	3,20	2,86	2,35		2,02	3,76	
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
4,53	3,95	2,44	2,45	3,16	2,32		4,00
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
4,84	4,30	3,25	2,81	2,91	2,86	3,54	4,34
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
5,24	4,35	3,46	3,50	3,07	3,34		
1	2	3	4	5	6	7	8
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
3,25	2,89	2,62	2,50	2,24	2,48	2,50	2,49
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd
3,55	3,17	2,86	2,72	2,71	2,65	2,69	2,75
La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt
3,73	3,13	2,86	2,74	2,74	2,68	2,71	2,77
							2,88
							3,01
9	10						

Из книги: *Ch. Kittel, Solid State Physics, 5th Ed., ch. 1, Table 4.* (Имеется перевод: Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела. — М.: Наука, 1978.)

Таблица 21.2. Кристаллические радиусы ионов различных элементов. (Из книги: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 70th Ed., CRC Press, Boca Raton, Florida, 1990, p. F187.)

Элемент	Заряд	Атомный номер	Радиус, Å	Элемент	Заряд	Атомный номер	Радиус, Å	Элемент	Заряд	Атомный номер	Радиус, Å
Ac	+3	89	1.18	Hf	+4	72	0.78	Ra	+2	88	1.43
Ag	+1	47	1.26	Hg	+1	80	1.27	Rb	+1	37	1.47
	+2		0.89		+2		1.10	Re	+4	75	0.72
Al	+3	13	0.51	Ho	+3	67	0.894		+7		0.56
Am	+3	95	1.07	I	-1	53	2.20	Rh	+3	45	0.68
	+4		0.92		+5		0.62	Ru	+4	44	0.67
Ar	+1	18	1.54		+7		0.50	S	-2	16	1.84
As	-3	33	2.22	In	+3	49	0.81		+2		2.19
	+3		0.58	Ir	+4	77	0.68		+4		0.37
	+5		0.46	K	+1	19	1.33		+6		0.30
At	+7	85	0.62	La	+1	57	1.39	Sb	-3	51	2.45
Au	+1	79	1.37		+3		1.061		+3		0.76
	+3		0.85	Li	+1	3	0.68		+5		0.62
B	+1	5	0.35	Lu	+3	71	0.85	Sc	+3	21	0.732
	+3		0.23	Mg	+1	12	0.82	Se	-2	34	1.91
Ba	+1	56	1.53		+2		0.66		-1		2.32
	+2		1.34	Mn	+2		0.80		+1		0.66
Be	+1	4	0.44		+3		0.66		+4		0.50
	+2		0.35		+4		0.60		+6		0.42
Bi	+1	83	0.98		+7		0.46	Si	-4	14	2.71
	+3		0.96	Mo	+1		0.93		-1		3.84
	+5		0.74		+4		0.70		+1		0.65
Br	-1	35	1.96		+6		0.62		+4		0.42
	+5		0.47	N	-3		1.71	Sm	+3	62	0.964
	+7		0.39		+1		0.25	Sa	-4	50	2.94
C	-4	6	2.60		+3		0.16		-1		3.70
	+4		0.16		+5		0.13		+2		0.93
Ca	+1	20	1.18	NH <sub>4</sub>	+1	41	1.43		+4		0.71
	+2		0.99	Na	+1		0.97	Sr	+2	38	1.12
Cd	+1	48	1.14	Nb	+1		1.00	Tb	+5	73	0.68
	+2		0.97		+4		0.74	Tb	+3	65	0.923
Ce	+1	58	1.27		+5		0.69		+4		0.84
	+3		1.034	Nd	+3	28	0.995	Tc	+7	43	0.979
	+4		0.92	Ne	+1	93	1.12	Te	-2	52	2.11
Cl	-1	17	1.81	Ni	+2		0.69		-1		2.50
	+5		0.34	Np	+3		1.10		+1		0.82
	+7		0.27		+4		0.95		+4		0.70
Co	+2	27	0.72		+7		0.71		+6		0.56
	+3		0.63	O	-2		1.32	Tb	+4	90	1.02
Cr	+1	24	0.81		-1		1.76	Ti	+1	22	0.96
	+2		0.89		+1		0.22		+2		0.94
	+3		0.63		+6		0.09		+3		0.76
	+6		0.52	Os	+4	15	0.88	Ti	+4		0.68
Cs	+1	55	1.67		+6		0.69	Tl	+1	81	1.47
Cu	+1	29	0.96	P	-3		2.12		+3		0.95
	+2		0.72		+3		0.44	Tm	+3	69	0.87
Dy	+3	66	0.908		+5		0.35	U	+4	92	0.97
Er	+3	68	0.881	Pa	+3		1.13		+6		0.80
Eu	+3	63	0.950		+4		0.98	V	+2	23	0.88
	+2		1.09		+5		0.89		+3		0.74
F	-1	9	1.33	Pb	+2	46	1.20		+4		0.63
	+7		0.08		+4		0.84		+5		0.59
Fe	+2	26	0.74	Pd	+2	61	0.80	W	+4	74	0.70
	+3		0.64		+4		0.65		+6		0.62
Fr	+1	87	1.80	Pm	+3	59	0.979	Y	+3	39	0.893
Ga	+1	31	0.81	Po	+6		0.67	Yb	+2	70	0.93
	+3		0.62	Pr	+3	78	1.013		+3		0.858
Gd	+3	64	0.938		+4		0.90	Zn	+1	30	0.88
Ge	-4	32	2.72	Pt	+2	94	0.80		+2		0.74
	+2		0.73		+4		0.65	Zr	+1	40	1.09
	+4		0.53	Pu	+3	1	1.08		+4		0.79
H	-1	1	1.54		+4		0.93				

рентгеновские K- и L-линии ( $n = 0, 1$ ) удовлетворяют закону Мозли

$$\omega^{1/2} = a(Z - b), \quad (38)$$

где  $b \approx 1$  для K-оболочки. Рис. 21.6 показывает, насколько хорошо закон Мозли выполняется для многих элементов: он широко используется для идентификации элементов в исследуемом веществе. Энергию внешнего электрона нейтрального атома можно получить из энергии ионизации. На рис. 21.7 показано, что для щелочных металлов она равна приблизительно 5 эВ и оказывается наибольшей у инертных газов, а именно в диапазоне от 24 эВ для Не до 11 эВ для Rn. Энергия этого внешнего электрона регулярно изменяется от периода к периоду, что ясно видно из рисунка.

## 6. МЕТОД ХАРТРИ—ФОКА

Для вычисления энергии уровней тяжелых атомов разработаны методы, начиная от упрощенных приближенных методов и заканчиваая весьма сложными методами, требующими выполнения многочисленных операций, для которых может понадобиться работа суперкомпьютера в течение многих дней. Вариационный метод, который был рассмотрен выше для гелия, используется и в случае значительно более тяжелых атомов и нередко включает минимизацию нескольких параметров  $\sigma_i$ . Намного более сложный подход, называемый методом Хартри—Фока, основан на решении одноименных уравнений (*M. Tinkham, Group Theory and Quantum Mechanics*, McGraw Hill, New York, 1964, p. 168).

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right] \phi_i(1) + \left[ \sum_{j \neq i} \int \phi_j^*(2) \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right) \phi_j(2) d\tau_2 \right] \phi_i(1) - \left[ \sum_{j \neq i} \frac{\int \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) (e^2 / 4\pi\epsilon_0 r_{12}) \phi_j(1) \phi_i(2) d\tau_2}{\phi_i^*(1) \phi_i(1)} \right] \phi_i(1) = E_i \phi_i(1). \quad (39)$$

Первый интеграл называется кулоновским, или прямым интегралом, а второй — обменным. Эта система состоит из  $Z$  уравнений, по одному для каждого электрона в атоме. Для вычисления интегралов используется набор пробных волновых функций  $\phi_i(r_k)$  и затем уравнения решаются относительно энергий и волновых функций. Операции повторяются до тех пор, пока в двух последовательных итерационных процедурах не будет получено пренебрежимо малое различие между энергиями и волновыми функциями. Эти вычисления могут потребовать много часов компьютерного времени.

# ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

---

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Первое знакомство с предметом квантовой механики связано с рассмотрением задач, имеющих точное решение, таких, как случай одномерного постоянного потенциала, прямоугольной потенциальной ямы, гармонического осциллятора, атома водорода и т. д. В действительности же мы имеем дело, как правило, с задачами, для которых либо нет точного решения, либо такие решения оказываются слишком громоздкими, чтобы ими можно было воспользоваться. Однако во многих случаях рассматриваемая задача близка к задаче с известным решением или является ее модификацией, и тогда для получения приближенных решений можно использовать методы теории возмущений. Настоящая глава посвящена этим методам.

## 2. РАЗЛОЖЕНИЕ В СТЕПЕННЫЕ РЯДЫ

В некоторых случаях квантовомеханическая задача на собственные значения сводится к решению квадратного или кубического уравнения, а разложение в степенной ряд позволяет получить приближенный, более доступный результат. В качестве примера рассмотрим систему двух спинов ( $S = \frac{1}{2}$ ,  $I = \frac{1}{2}$ ) в магнитном поле  $B$ , которую мы изучали в разд. 4 гл. 18. Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = g\mu_B S_z B + T \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}. \quad (1)$$

Он описывает эффект Зеемана в случае атома водорода. Для простоты в этом выражении мы опустили слагаемое  $g_N \mu_N I_z$ , отвечающее ядерному эффекту Зеемана. В гл. 18 прямой диагонализацией матрицы гамильтониана были получены четыре энергии [выраже-

ние (18)]:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{1}{2}g\mu_B B + \frac{1}{4}T, \\ E_2 &= -\frac{1}{4}T - \frac{1}{2}[(g\mu_B B)^2 + T^2]^{1/2}, \\ E_3 &= -\frac{1}{4}T + \frac{1}{2}[(g\mu_B B)^2 + T^2]^{1/2}, \\ E_4 &= +\frac{1}{2}g\mu_B B + \frac{1}{4}T, \end{aligned} \quad (2)$$

где нумерация уровней отличается от принятой в гл. 18. В пределе  $T \ll g\mu_B B$  можно получить приближенные выражения для  $E_2$  и  $E_3$ . Разлагая квадратный корень в степенной ряд

$$(1+x)^n \approx 1 + nx + n(n-1)x^2/2! + \dots, \quad (3)$$

где  $n = \frac{1}{2}$ , и сохраняя в разложении первые два члена, получим

$$E_2 = -\frac{1}{2}g\mu_B B - \frac{1}{4}T - \frac{1}{4}T^2/g\mu_B B, \quad (4)$$

$$E_3 = +\frac{1}{2}g\mu_B B - \frac{1}{4}T + \frac{1}{4}T^2/g\mu_B B. \quad (5)$$

Если пренебречь членами второго порядка малости  $\pm T^2/4g\mu_B B$ , то гамильтониан можно записать в следующем приближенном виде:

$$\mathcal{H} = g\mu_B B M_S + T M_S M_I, \quad (6)$$

который нередко встречается в работах по электронному спиновому резонансу.

### 3. СТАЦИОНАРНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

Основные формулы теории не зависящих от времени возмущений выводятся в стандартных учебниках по квантовой механике, поэтому здесь мы их лишь процитируем. Предположим, что имеется основной гамильтониан  $\mathcal{H}_0$ , энергии  $E_{0i}$  которого известны, и возмущение  $\mathcal{H}'$ , которое значительно меньше основного гамильтониана. Допустим, что известны также волновые функции  $|i\rangle$ , отвечающие энергиям  $E_{0i}$  для  $\mathcal{H}_0$ . Недиагональные матричные элементы основного гамильтониана обращаются в нуль,  $\langle i|\mathcal{H}_0|j\rangle = 0$  при  $i \neq j$ , поскольку  $|i\rangle$  и  $|j\rangle$  представляют собой собственные функции гамильтониана  $\mathcal{H}_0$ . Метод теории возмущений основан на вычислении матричных элементов  $\langle i|\mathcal{H}'|j\rangle$  возмущенного гамильтониана и на использовании их для получения приближенных значений энергий  $E_j$  и волновых функций  $\psi_j$  полного гамильтониана  $\mathcal{H}$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'. \quad (7)$$

Во многих учебниках по квантовой механике записываются общие выражения для энергий и волновых функций, но на практике фор-

мулы для энергий с точностью выше второго порядка редко используются, поэтому мы ограничимся результатами, получаемыми с точностью до нулевого, первого и второго порядков.

Энергии нулевого порядка  $E_{0i}$  и первого порядка  $E_{1i}$   $i$ -го уровня даются выражениями

$$E_{0i} = \langle i | \mathcal{H}_0 | i \rangle, \quad (8a)$$

$$E_{1i} = \langle i | \mathcal{H}' | i \rangle, \quad (8b)$$

и энергия  $E_i$  с точностью до второго порядка получается добавлением члена второго порядка:

$$E_i = E_{0i} + \langle i | \mathcal{H}' | i \rangle + \sum_j' \frac{\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle \langle j | \mathcal{H}' | i \rangle}{E_{0i} - E_{0j}}. \quad (9)$$

Штрих у знака суммы  $\sum'$  указывает на то, что сумма берется по всем значениям  $j$ , причем член с  $j = i$  исключается. Из этого выражения мы видим, что для основного состояния знаменатели члена второго порядка отрицательны, а это означает, что поправка второго порядка в любом случае уменьшает энергию основного состояния. Более высокие энергетические уровни во втором порядке могут как подниматься, так и опускаться. Волновые функции первого порядка  $\psi'_{1i}$  получаются из тех же матричных элементов, что и энергии:

$$\psi'_{1i} = \psi_{0i} + \sum_j' \frac{\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle}{E_{0i} - E_{0j}} \psi_{0j}. \quad (10)$$

Можно было бы выписать и члены более высоких порядков, но они обычно не используются на практике. Следует заметить, что эти волновые функции  $\psi'_{1i}$  не нормированы и штрих у  $\psi'_{1i}$  указывает на отсутствие нормировки. Однако это не столь важно, так как  $\psi'_{1i}$  и  $\psi_{0i}$  очень близки, а члены под знаком суммы малы.

Очевидно, что поправки первого порядка к энергии вычисляются с помощью волновых функций нулевого порядка. Если сравнить выражения (9) и (10), то видно, что энергии второго порядка возникают на основе волновых функций первого порядка. Аналогичным образом волновые функции второго порядка дают поправки к энергии третьего порядка и т. д.

#### 4. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА В АТОМЕ ВОДОРОДА

В качестве примера применения не зависящей от времени теории возмущений исследуем зеемановский гамильтониан (1) для атома

водорода ( $S = \frac{1}{2}$ ,  $I = \frac{1}{2}$ ) в приближении сильного магнитного поля, когда основной и возмущенный гамильтонианы соответственно записываются в виде

$$\mathcal{H}_0 = g\mu_B S_z B, \quad (11)$$

$$\mathcal{H}' = T\mathbf{S} \cdot \mathbf{I} = \quad (12)$$

$$= T[S_x I_x + S_y I_y + S_z I_z]. \quad (13)$$

Матричные элементы были получены в разд. 4 гл. 18. Энергии нулевого порядка для четырех уровней имеют вид

$$\begin{aligned} E_{01} = E_{02} &= -\frac{1}{2}g\mu_B B, \\ E_{03} = E_{04} &= +\frac{1}{2}g\mu_B B, \end{aligned} \quad (14)$$

а матрица для  $\mathcal{H}'$  согласно выражению (17) гл. 18 записывается следующим образом:

$$\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4}T & \frac{1}{2}T & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}T & -\frac{1}{4}T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}T \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Диагональные матричные элементы  $\langle i | \mathcal{H}' | i \rangle$  представляют собой поправки первого порядка к энергии, а квадрат недиагонального элемента  $|\langle 2 | \mathcal{H}' | 3 \rangle|^2$ , деленный на разность энергий нулевого порядка  $E_{03} - E_{02} = g\mu_B B$  из (14), дает поправку второго порядка к энергии в выражении (9). Результирующие энергии представлены на рис. 22-1. Следует заметить, что приведенные в (16) значения энергий  $E_2$  и  $E_3$  согласуются с выражениями (4) и (5) для этих энергий, полученными разложением в степенные ряды. Из рис. 22-1 видно, что основной уровень  $E_2$  понижается при введении поправки второго порядка к энергии.

Энергетич. уровень	Нулевой порядок	Первый порядок	Второй порядок	Квантовое число		
				$M_S$	$M_I$	
$E_1$	$-\frac{1}{2}g\mu_B B$	$+\frac{1}{4}T$	—	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	(16)
$E_2$	$-\frac{1}{2}g\mu_B B$	$-\frac{1}{4}T$	$-\frac{1}{4}T^2/g\mu_B B$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	
$E_3$	$+\frac{1}{2}g\mu_B B$	$-\frac{1}{4}T$	$+\frac{1}{2}T^2/g\mu_B B$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	
$E_4$	$+\frac{1}{2}g\mu_B B$	$+\frac{1}{4}T$	—	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	

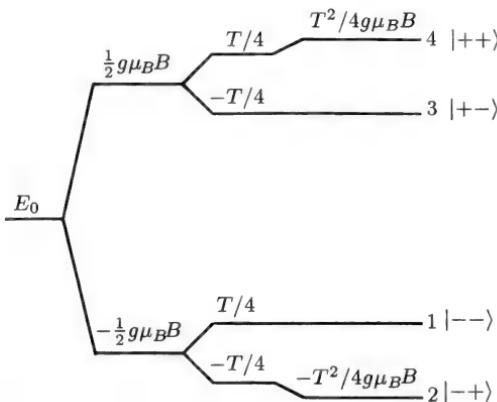


Рис. 22.1. Энергетические уровни системы двух спинов ( $S = \frac{1}{2}$ ,  $I = \frac{1}{2}$ ). Слева направо: нерасщепленная линия, зеемановское расщепление, сверхтонкое расщепление первого порядка и сверхтонкое расщепление второго порядка. Справа приведены состояния  $|m_S m_I\rangle$ .

Поскольку два энергетических состояния ( $i = 1$  и  $i = 4$ ) не имеют недиагональных матричных элементов

$$\langle i | \mathcal{H} | j \rangle = E_{0i} \delta_{ij}, \quad i = 1, 4, \quad (17)$$

их волновые функции известны и мы можем их выписать в базисе  $|M_S M_I\rangle$

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \\ \psi_4 &= \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

У матрицы  $\mathcal{H}'$  всего два недиагональных члена, причем одного и того же вида, так что, определив коэффициент  $\beta'$ ,

$$\beta' = \frac{\langle 3 | \mathcal{H}' | 2 \rangle}{E_{03} - E_{02}} = \frac{\frac{1}{2}T}{g\mu_B B}, \quad (19)$$

мы получим ортогональные, но ненормированные волновые функции первого порядка

$$\begin{aligned} \psi'_2 &= \psi_{02} - \beta' \psi_{03}, \\ \psi'_3 &= \psi_{03} + \beta' \psi_{02}. \end{aligned} \quad (20)$$

Эти волновые функции можно нормировать, введя

$$\alpha = \frac{1}{(1 + \beta'^2)^{1/2}}, \quad (21)$$

$$\beta = \frac{\beta'}{(1 + \beta'^2)^{1/2}},$$

что дает

$$\psi_2 = \alpha \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle - \beta \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (22)$$

$$\psi_3 = \alpha \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle,$$

где  $\alpha \approx 1$  и  $\beta \ll 1$ . Все четыре волновые функции (18) и (22) теперь нормированы и ортогональны.

## 5. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В СЛУЧАЕ ВЫРОЖДЕНИЯ

Если две энергии основного гамильтониана одинаковы, т. е. состояние вырожденно,

$$E_{0i} = E_{0j}, \quad (23)$$

и имеется не равный нулю недиагональный матричный элемент, связывающий их,

$$\langle i | \mathcal{H} | j \rangle \neq 0, \quad (24)$$

то теорию возмущений второго порядка применять нельзя, поскольку в выражении (9) знаменатель под знаком суммы обращается в нуль для этих уровней. Прежде чем можно будет применять теорию возмущений, необходимо диагонализовать  $2 \times 2$ -матрицу

$$\begin{pmatrix} \langle i | \mathcal{H} | i \rangle & \langle i | \mathcal{H} | j \rangle \\ \langle j | \mathcal{H} | i \rangle & \langle j | \mathcal{H} | j \rangle \end{pmatrix}, \quad (25)$$

чтобы избежать вырождения. После диагонализации можно вычислить новые волновые функции и использовать их для построения новой матрицы гамильтониана, который уже не будет вырожденным. Рассмотренный здесь тип вырождения встречается достаточно часто.

Мы обсудили случай полного вырождения. Если вырождение является частичным и для пары недиагональных матричных элементов не выполняется критерий

$$\langle i | \mathcal{H} | j \rangle^2 \ll |\langle i | \mathcal{H} | i \rangle - \langle j | \mathcal{H} | j \rangle|, \quad (26)$$

то следует применять теорию возмущений при наличии вырождения. Это гарантирует, что в выражении (9) любой член второго порядка под знаком суммы будет много меньше основной энергии  $E_{0i}$ .

## 6. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

До сих пор мы рассматривали случай, когда гамильтониан  $\mathcal{H}_0$ , и возмущение гамильтониана  $\mathcal{H}'$  не зависят от времени. Перейдем теперь к случаю, когда  $\mathcal{H}_0$  остается стационарным, а возмущение  $\mathcal{H}'(t)$  зависит от времени:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}_0(\mathbf{r}) + \mathcal{H}'(\mathbf{r}, t). \quad (27)$$

Зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (28)$$

имеет решение

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (29)$$

где коэффициенты  $a_n(t)$  зависят только от времени. Если эту волновую функцию подставить в зависящее от времени уравнение Шредингера (28) и использовать невозмущенное уравнение Шредингера  $\mathcal{H}_0 \phi_n = E_n \phi_n$ , чтобы сократить два члена, то получим

$$i\hbar \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \phi_n \frac{da_n}{dt} = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} a_n \mathcal{H}' \phi_n. \quad (30)$$

Умножая обе части слева на невозмущенную волновую функцию и интегрируя по пространственным координатам, находим временну́ю зависимость коэффициентов  $a_m(t)$

$$\frac{da_m}{dt} = -(i/\hbar) \sum_n e^{-i\omega_{mn} t} a_n(t) \mathcal{H}'_{mn}(t), \quad (31)$$

где боровская угловая частота  $\omega_{mn}$  дается выражением

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar, \quad (32)$$

а матричный элемент  $\mathcal{H}'_{mn}(t)$ ,

$$\mathcal{H}'_{mn}(t) = \int \phi_m^* \mathcal{H}'(t) \phi_n d\tau, \quad (33)$$

может зависеть от времени; здесь была использована ортонормированность невозмущенных волновых функций  $\phi_n(\mathbf{r})$ .

Как правило, в начальный момент времени  $t = 0$  система находится в определенном начальном квантовом состоянии  $i$ , т. е.

$$a_j(0) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i. \end{cases} \quad (34)$$

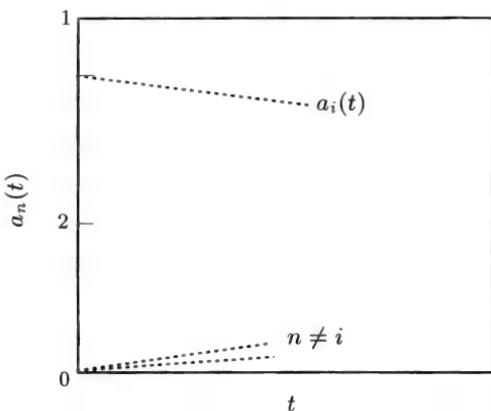


Рис. 22.2. Зависимость от времени начальной амплитуды  $a_i(t)$  и двух других амплитуд  $a_n(t)$  с  $n \neq i$  согласно нестационарной теории возмущений для моментов времени  $t \ll \hbar/\mathcal{H}'_{ii}$ .

При этом выражение (31) принимает вид

$$\frac{da_i}{dt} \approx -(i/\hbar)a_i(t)\mathcal{H}'_{ii}(t), \quad \text{состояние } i, \quad (35a)$$

$$\frac{da_n}{dt} \approx -(i/\hbar)e^{-i\omega_{ni}t}\mathcal{H}'_{ni}(t), \quad \text{состояния } n \neq i, \quad (35b)$$

где в выражении (35a) для состояния  $i$  мы сохранили  $a_i(t)$ , а в выражении (35b) для  $n \neq i$  положили  $a_i(t) = 1$ . Это основные выражения зависящие от времени теории возмущений первого порядка. Они справедливы для достаточно коротких отрезков времени, на протяжении которых амплитуда состояния  $|a_i(t)|$  остается близкой к единице. Разумеется, со временем  $a_i(t)$  должна уменьшаться, поскольку заселяются другие состояния, но теория первого порядка предполагает, что система остается близкой к своему начальному состоянию. На рис. 22.2 представлена типичная временная эволюция начального состояния  $a_i(t)$  и двух других амплитуд  $a_n(t)$  для моментов времени  $t \ll \hbar/\mathcal{H}'_{ii}$ .

Особенно простым является случай, когда возмущение  $\mathcal{H}'$  включается в момент времени  $t = 0$  и в дальнейшем не зависит от времени. Мы ограничимся достаточно короткими промежутками времени, пока система все еще близка к своему начальному состоянию, т. е. величина  $a_i(t)$  остается близкой к единице. Для этого случая

выражение (35a), проинтегрированное от  $t = 0$  до более позднего момента времени  $t$ , дает

$$a_i(t) = e^{-i\mathcal{H}_{ii}t/\hbar}, \quad (36)$$

т. е. амплитуда начального состояния  $a_i(t)$  колеблется с частотой  $\omega_i = \mathcal{H}_{ii}/\hbar$ . (37)

Выражение (36) применимо, пока времена достаточно коротки, и выражения (35) дают хорошее приближение.

Амплитуды  $a_n(t)$ , отвечающие уровням, энергии которых определяются возмущением  $\mathcal{H}'$ , находятся в результате интегрирования выражения (35b) по тому же интервалу времени:

$$a_n(t) = \frac{\mathcal{H}'_{ni}(1 - e^{-i\omega_{ni}t})}{\omega_{ni}\hbar}. \quad (38)$$

Абсолютная величина этих амплитуд дается выражением

$$|a_n(t)| = \frac{2|\mathcal{H}'_{ni}|\sin \frac{1}{2}\omega_{ni}t}{|E_n - E_i|}, \quad (39)$$

где использовано соотношение (32). Для достаточно коротких промежутков времени при выполнении условия  $\omega_{ni} \ll 1$  имеем

$$a_n(t) = -i(\mathcal{H}'_{ni}/\hbar)t. \quad (40)$$

Таким образом,  $a_n(t)$  вначале увеличивается линейно со временем, как показано на рис. 22.2, а затем, когда неравенство  $\omega_{ni}t \ll 1$  нарушается, амплитуда  $a_n(t)$  колеблется с периодом  $\tau = 2/\omega_{ni}$  и амплитудой  $[2\mathcal{H}'_{ni}/\hbar\omega_{ni}]$ , при стандартном предположении

$$\mathcal{H}'_{ni} \ll |E_n - E_i| \quad (41)$$

стационарной теории возмущений.

## 7. ВЕРОЯТНОСТЬ ПЕРЕХОДА

Вероятность найти систему в состоянии  $n$  в момент времени  $t$  дается квадратом модуля амплитуды (39):

$$|a_n(t)|^2 = \frac{4|\mathcal{H}'_{ni}|^2 \sin^2 \frac{1}{2}\omega_{ni}t}{\hbar^2 \omega_{ni}^2}. \quad (42)$$

Вероятность перехода  $w$  в единицу времени в возбужденное состояние, принадлежащее группе близко расположенных между собой энергетических уровней, вычисляется суммированием по этим возбужденным уровням:

$$w = t^{-1} \sum |a_n(t)|^2, \quad (43)$$

и при большом числе близких уровней суммирование можно заменить интегрированием по энергии:

$$w = t^{-1} \int |a_n(t)|^2 \rho(n) dE_n; \quad (44)$$

здесь  $\rho(n)$  — плотность состояний. Величины  $\mathcal{H}'_{ni}$  и  $\rho(n)$ , как правило, медленно изменяются с энергией, поэтому их можно вынести за знак интеграла:

$$w = \frac{4|\mathcal{H}'_{ni}|^2 \rho(n)}{t\hbar} \int \frac{\sin^2 \frac{1}{2}\omega_{ni}t}{\omega_{ni}^2} d\omega_{ni}. \quad (45)$$

Подынтегральное выражение представляет собой функцию с резко выраженным максимумом, как показано на рис. 22.3, так что интегрирование можно распространить от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Используя определенный интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{-2} \sin^2 x dx = \pi, \quad (46)$$

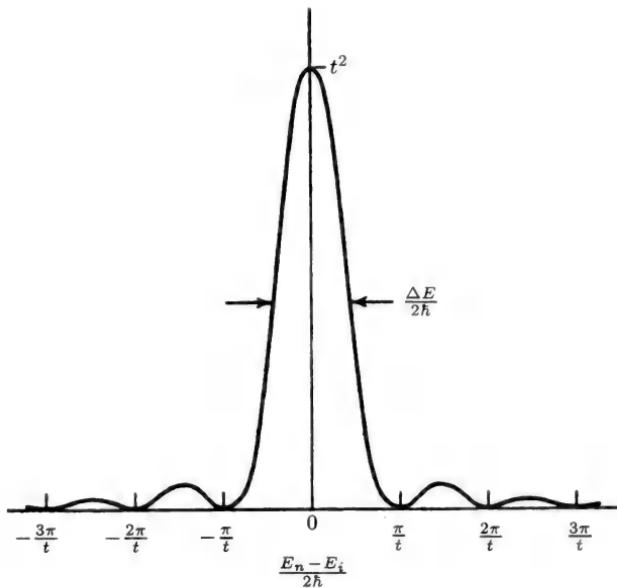


Рис. 22.3. Функция с резким максимумом в подынтегральном выражении (45) для вероятности перехода  $w$ . (Из книги: R. M. Eisberg, Fundamentals of Modern Physics, Wiley, New York, 1961, Fig. 9-8.)

получим следующее выражение для  $w$ :

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(n) |\mathcal{H}'_{ni}|^2, \quad (47)$$

которое не зависит от времени. Это и есть вероятность перехода в единицу времени под влиянием возмущения из начального основного состояния  $E_i$  в возбужденное состояние  $E_n$  в предположении, что возмущение является достаточно слабым или время достаточно коротким и основной уровень остается еще заметно заселенным.

## 8. РАССЕЯНИЕ

Рассмотрение задач рассеяния обычно начинается с падающей плоской волны  $e^{ikz}$  и предполагается, что уходящая волна описывается волновой функцией

$$\psi(r, \theta, \varphi) = e^{ikz} + \chi(\mathbf{r}), \quad (48)$$

представляющей собой сумму падающей волны и рассеянной сферической волны  $\chi(\mathbf{r})$  с угловой зависимостью  $f(\theta, \varphi)$ :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = e^{ikz} + r^{-1} f(\theta, \varphi) e^{ikr}. \quad (49)$$

Для простоты предположим, что имеет место аксиальная симметрия, т. е.  $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$ . При решении многих задач рассеяния считают, что рассеивающий потенциал  $U(\mathbf{r})$  является возмущением, поэтому рассеянная волна  $\chi(r)$  представляет собой небольшую добавку к падающей волне  $e^{ikz}$ .

Дифференциальное сечение рассеяния  $\sigma(\theta)$ ,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2, \quad (50)$$

во многих случаях разлагают в ряд по парциальным волнам, характеризуемым фазовыми сдвигами  $\delta_L$ :

$$\sigma(\theta) = (1/k^2) \sum (2L+1) e^{i\delta_L} \sin \delta_L P_L(\cos \theta)^2. \quad (51)$$

Интегрирование дифференциального сечения по углу  $\theta$  дает полное сечение рассеяния в виде суммы по  $L$  парциальным волнам:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin \theta d\theta = (4\pi/k^2) \sum (2L+1) \sin^2 \delta_L. \quad (52)$$

Таким образом, фазовый сдвиг  $\delta_L$  характеризует вклад  $L$ -го полинома Лежандра  $P_L(\cos \theta)$  в рассеяние и может быть определен экспериментально.

## ГАЗЫ, ЖИДКОСТИ И ТВЕРДЫЕ ТЕЛА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая глава посвящена рассмотрению трех состояний вещества, а именно газов, жидкостей и твердых тел. Начнем с изучения газов и жидкостей. Твердые тела мы будем рассматривать с точки зрения их структуры. Электропроводность твердых тел обсуждается в следующей главе. Ряд свойств твердых тел исследовался в предыдущих главах — это колебания решетки (гл. 4), удельная теплоемкость и теплопроводность (гл. 8), электрические, магнитные (гл. 10 и 11), а также оптические свойства (гл. 13 и 14).

### 2. ГАЗЫ

В газообразном состоянии отсутствует любая упорядоченность, как ближняя, так и дальняя. Молекулы газа движутся хаотически и либо не взаимодействуют друг с другом, либо слабо взаимодействуют благодаря силам Ван-дер-Ваальса. Простейшим газовым законом невзаимодействующих молекул является закон идеального газа, согласно которому произведение давления  $P$  и объема  $V$  пропорционально абсолютной температуре  $T$ :

$$PV = NRT; \quad (1)$$

здесь  $N$  — число молей, а универсальная газовая постоянная  $R$  равна постоянной Авогадро  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$  моль $^{-1}$ , умноженной на постоянную Больцмана  $k_B$ :

$$R = N_A k_B. \quad (2)$$

Закон идеального газа (1) можно также записать через молярную плотность  $\rho = N/V$ :

$$P = \rho RT. \quad (3)$$

Более правдоподобный закон предполагает, что молекулы газа создают друг у друга электрические диполи, возникающие при смещении отрицательных электронных облаков относительно положительных ядер. Наведенные дипольные моменты взаимодействуют между собой за счет притяжения, которое спадает с расстоянием как  $1/r^6$ , т. е. в газе как  $1/V^2$ . Общий эффект состоит в уменьшении давления в газе на величину  $a/V^2$ , где  $a$  — постоянная, характерная для конкретного газа. Кроме того, истинный объем газа, в котором движутся его молекулы, следует уменьшить на фактический объем  $b$ , занимаемый самими молекулами газа; в результате формула для давления имеет вид

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2}, \quad (4)$$

где мы положили  $N = 1$ . Это уравнение состояния, представленное на рис. 23.1 для нескольких температур, нетрудно преобразовать к обычному виду:

$$\left\{ P + \frac{a}{V^2} \right\} (V - b) = RT. \quad (5)$$

Это уравнение называется уравнением Ван-дер-Ваальса; оно дает хорошее качественное описание реальных газов, в том числе и фазового перехода газ — жидкость. Постоянные Ван-дер-Ваальса  $a$  и  $b$  известны для многих газов. В предельных случаях  $PV^2 \gg a$  и  $V \gg b$ , которые имеют место при высокой температуре, уравнение (5) сводится к закону идеального газа  $PV = RT$ . На протяжении многих лет предлагались многочисленные, в большей степени отвечающие действительности газовые законы, но все с ограниченной областью применения.

### 3. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

При температурах ниже критической  $T_c$  изотермы на рис. 23.1 демонстрируют резкое изменение объема при переходе между жидкостью и газовой фазами. Выше критической точки, определяемой выражениями

$$\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right) = 0, \quad \left( \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right) = 0, \quad (6)$$

жидкое состояние не может существовать. В случае вандерваальсова газа в критической точке выполняются следующие равенства:

$$P_c = a/27b^2, \quad V_c = 3b, \quad T_c = 8a/27bR, \quad (7)$$

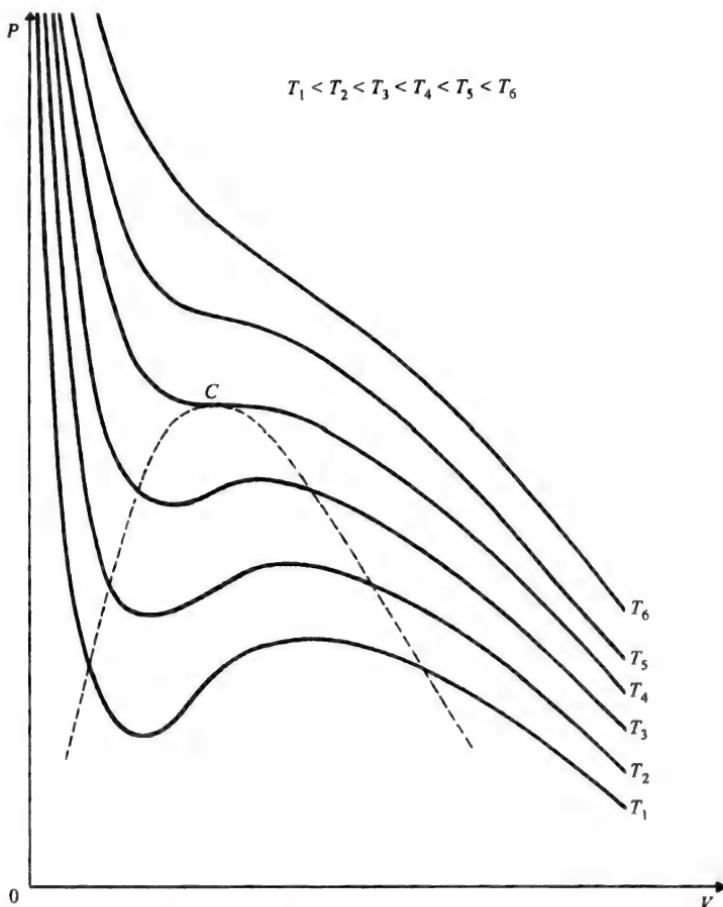


Рис. 23.1. Зависимость давления от объема вандерваальсова газа при различных температурах. Критическая изотерма  $T_4$  разделяет жидкую и газовую фазы; критическая точка обозначена буквой  $C$ . (Из книги: *F. Reif, Statistical Thermal Physics*, McGraw-Hill, New York, 1965, p. 307.)

а также соотношение

$$RT_c/P_c V_c = 8/3 = 2,67. \quad (8)$$

Для большинства газов значения  $RT_c/P_c V_c$  находятся в пределах 1,2 – 1,3.



Рис. 23.2. Диаграмма давление – температура, на которой присутствуют твердая, жидкая и газообразная фазы вещества. В тройной точке (ТТ) все три фазы находятся в равновесии. Для вещества типа воды, в которой твердая фаза плавает в жидкой, кривая плавление – затвердение имеет изображенный на рисунке отрицательный наклон.

На диаграмме зависимости  $P$  от  $T$  рис. 23.2 построены кривые постоянного объема, называемые изохорами; фазы разделяются тремя кривыми, одна из которых называется кривой сублимации или возгонки, другая – кривой плавления и третья – кривой испарения. Каждое вещество характеризуется тройной точкой, в которой существуют все три фазы и которой соответствуют определенные значения температуры и давления. Из рисунка видно, что возгонка, или прямой переход между твердым телом и газовой фазой, происходит ниже тройной точки.

На рис. 23.2 кривая плавления имеет отрицательный наклон, что соответствует веществу, подобному воде, которая при замерзании расширяется, так что лед плавает в воде. У большинства веществ кривая плавления имеет положительный наклон, и твердая фаза тонет в жидкой фазе. Наклон кривой  $dP/dT$  определяется уравнением состояния для кривой плавления, называемым уравнением Клапейрона – Клаузиуса (гл. 8, разд. 8), которое имеет вид

$$\frac{dP}{dT} = \frac{L}{T(V_L - V_S)}, \quad (9)$$

где  $L$  – скрытая теплота фазового перехода, причем для воды  $V_L < V_S$ . Наклон кривых возгонки и испарения всегда положителен.

#### 4. ЖИДКОЕ СОСТОЯНИЕ И ФЛУКТУАЦИИ

Жидкость — это вещество, для которого характерно наличие ближней упорядоченности и отсутствие дальней упорядоченности. Межмолекулярные расстояния и ориентации молекул характерные для окрестности отдельной молекулы, совпадают с их конфигурацией у других молекул. Ближайшие соседние молекулы располагаются определенным образом относительно друг друга, тогда как более удаленные молекулы ориентированы хаотически. Например, когда ионное химическое соединение типа  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  растворяется в воде, вокруг ионов  $\text{Cr}^{3+}$  образуются диполи  $\text{H}_2\text{O}$  с отрицательно заряженными ионами  $\text{O}^-$ , ориентированными в направлении  $\text{Cr}^{3+}$ , что соответствует ближней упорядоченности около каждого иона  $\text{Cr}^{3+}$ . Дальняя упорядоченность отсутствует, поскольку различные октаэдры  $\text{CrO}_6$  движутся хаотически относительно друг друга и оказываются ориентированы случайным образом.

Отсутствие дальней упорядоченности обусловлено непрерывным тепловым движением молекул относительно друг друга, которое служит причиной броуновского движения. Согласно теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы (закону равнораспределения) каждой степени свободы соответствует энергия  $\frac{1}{2}k_B T$ , так что молекула жидкости массой  $m$  обладает средней кинетической энергией в направлении оси  $x$

$$\langle \frac{1}{2}mv_x^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (10)$$

и аналогично в направлении двух других осей, так что средняя кинетическая энергия равна

$$\langle \frac{1}{2}mv^2 \rangle = \frac{3}{2}k_B T; \quad (11)$$

здесь  $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle v^2 \rangle$ .

Простой подход к описанию броуновского движения основан на уравнении Ланжевена

$$m \frac{dv}{dt} = F'(t), \quad (12)$$

где  $F'(t)$  — сила взаимодействия массы  $m$  в жидкости с системой, обладающей большим числом степеней свободы. Величина  $F'(t)$  зависит от положения соседних атомов, находящихся в постоянном движении, и, следовательно, испытывает быстрые и весьма нерегулярные флуктуации. Интенсивность флуктуаций характеризуется временем корреляций  $\tau_c$ , которое по порядку величины равно

среднему расстоянию между молекулами, деленному на среднюю скорость молекул. Для типичных жидкостей с низкой вязкостью  $\tau_c \approx 10^{-13}$  с.

Флюктуирующую силу  $F'(t)$  можно представить в виде суммы быстро хаотически флюктуирующей части  $F_r(t)$ , среднее значение которой равно нулю,

$$\langle F'(t) \rangle = 0, \quad (13)$$

и медленно меняющейся части  $-\alpha v$ , которая пропорциональна скорости частицы  $v$  и тормозит ее движение. Коэффициент трения  $\alpha$  зависит от размера, формы, скорости и, возможно, ориентации движущейся частицы. При этом уравнение Ланжевена принимает вид

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_r(t). \quad (14)$$

Если на систему действует еще и внешняя сила, ее следует добавить в правую часть уравнения. Коэффициент трения  $\alpha$  для сферической частицы небольшого размера радиусом  $a$ , движущейся в ламинарном потоке, дается законом Стокса.

$$\alpha = 6\pi\eta a, \quad (15)$$

где  $\eta$  — коэффициент вязкости. Если в жидкости присутствует турбулентность, то сила сопротивления зависит от скорости в более высокой степени.

Чтобы понять смысл величины  $\alpha$ , рассмотрим случай, когда к жидкости, содержащей взвешенную частицу массой  $m$  и зарядом  $e$ , приложено внешнее электрическое поле  $\mathcal{E}$ . При этом уравнение Ланжевена запишется в виде

$$m \frac{dv}{dt} = e\mathcal{E} - \alpha v + F_r(t). \quad (16)$$

После начального периода ускорения в жидкости, если отвлечься от флюктуаций, устанавливается равномерное движение с конечной скоростью  $v_0$ ,

$$e\mathcal{E} = \alpha v_0. \quad (17)$$

Если мы определим подвижность  $\mu$  как скорость равномерного движения, отнесенную к величине электрического поля,

$$\mu = v_0/\mathcal{E}, \quad (18)$$

то получим коэффициент трения

$$\alpha = e/\mu. \quad (19)$$

Составлены таблицы подвижностей различных ионов в водных растворах. Эти подвижности играют важную роль в электрофорезе,

который применяется для разделения и, возможно, для идентификации макромолекул.

Аналогичный результат получается в случае падения частицы в жидкости под действием силы тяжести  $mg$ . При этом в уравнении (16) член  $e\mathcal{E}$  заменяется на  $mg$ , и мы получаем конечную скорость

$$v_0 = mg/\alpha = mg/6\pi\eta a, \quad (20)$$

где использован закон Стокса (15) для сферической частицы. При центрифугировании с угловой скоростью  $\omega$  внешней силой является центробежная сила, равная  $mr\omega^2$ , и конечная радиальная скорость равна

$$v_0 = mr\omega^2/\alpha = mr\omega^2/6\pi\eta a. \quad (21)$$

## 5. ДИФФУЗИЯ

Если концентрация  $n$  молекул в растворе изменяется от точки к точке, молекулы будут медленно диффундировать в направлении выравнивания концентрации. При наличии постоянного градиента концентрации  $\partial n/\partial z$  в направлении оси  $z$  в этом направлении возникнет поток молекул  $J_z$ , определяемый выражением

$$J_z = -D \frac{\partial n}{\partial z}, \quad (22)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии, называемый также коэффициентом самодиффузии и имеющий размерность  $\text{м}^2/\text{с}$ . Процесс диффузии в направлении  $z$  описывается уравнением диффузии

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}. \quad (23)$$

Во многих случаях диффузия является активационным процессом с энергией активации  $E_A$ ,

$$D = D_0 \exp[-E_A/k_B T], \quad (24)$$

где  $D_0$  — постоянный множитель.

Если к раствору ионов с зарядом  $q$  приложено электрическое поле  $E$ , на ионы действует сила  $qE$  и они движутся в направлении поля  $E$ . Это приводит к возникновению градиента концентрации (22) и потоку ионов  $J_z$  в противоположном направлении, который стремится уравновесить поток ионов, создаваемый приложенным

полем. В этом случае коэффициент диффузии дается соотношением Эйнштейна—Нернста

$$D = k_B T \mu / q, \quad (25)$$

где  $q$  — заряд ионов, а  $\mu$  — их подвижность.

В жидкостях хаотическое движение молекул имеет главным образом характер вращения, и вероятность  $\psi_{(\theta, \varphi, t)}$  ориентации оси молекулы под углами  $\theta, \varphi$  изменяется во времени в соответствии с выражением

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{D_{\text{вращ}}}{a^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\}, \quad (26)$$

где  $a$  — радиус молекулы. Время корреляции  $\tau_c$  для этого процесса обратно пропорционально коэффициенту диффузии,

$$\tau_c = a^2 / 2D_{\text{вращ}} \quad (27)$$

и часто называется дебаевским временем корреляции.

В жидкостях с низкой вязкостью в масштабе атомных и молекулярных расстояний диффузия происходит очень быстро, например в воде при температуре 20°C вращательное время корреляции равно  $3,5 \cdot 10^{-12}$  с. Однако в макроскопических масштабах порядка 1 см диффузия в невозмущенных жидкостях происходит очень медленно, причем масштаб времени составляет, возможно, часы и даже сутки, и слабое помешивание значительно увеличивает скорость диффузии. Диффузия может происходить и в твердых телах, но масштабы времени при этом оказываются намного больше, чем в жидкостях. Стекла по существу представляют собой замороженные твердые тела, расположение молекул в которых сходно с жидкостями, но скорость молекулярной диффузии такая же, как в твердых телах.

## 6. СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

У кристаллических твердых тел присутствует как дальняя, так и ближняя упорядоченность. Если две соседние молекулы имеют определенную ориентацию относительно друг друга и относительно кристаллографических осей, то две аналогичные молекулы, отстоящие на расстояние в 10 или 100 периодов кристаллической решетки, должны иметь те же ориентации. Атомы занимают в решетке регулярные положения, хотя из-за тепловой энергии они совершают колебания относительно этого положения, а некоторые молекулярные группы, такие как метил ( $-\text{CH}_3$ ), могут совершать в твердых телах вращательные движения.

**Таблица 23.1.** Семь кристаллических сингоний и их характеристики. Четырнадцать типов кристаллических решеток, классифицируемых как примитивные (Р, один атом на элементарную ячейку), объемноцентрированные (І, два атома на элементарную ячейку), гранецентрированные (F, четыре атома на ячейку) и базоцентрированные в вершинах и в центрах противоположных граней (B, C, два атома на ячейку).

Сингония	Ребра	Углы	Типы решеток
Кубическая	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I, F
Тетрагональная	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I
Ромбическая	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I, F, C
Гексагональная	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	P
Тригональная	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	P (называемая также R)
Моноклинная	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	P, B
Триклинная	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P

Существует семь систем (сингоний) расположения атомов в кристаллической решетке. Сингонии классифицируются в соответствии с длинами  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и углами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  стандартной элементарной ячейки, как показано в табл. 23.1 и на рис. 23.3. У трех из них все оси составляют друг с другом прямой угол: кубическая сингония, в которой все три ребра имеют одинаковую длину; тетрагональная, в которой два ребра из трех имеют одинаковую длину; и ромбическая, в которой все три ребра имеют различные длины ( $a \neq b \neq c$ ). Триклинная сингония обладает наименшей из возможных симметрий: длины всех ребер и все углы различны. Моноклинная — вторая наименшая симметрия, при которой длины всех ребер различны ( $a \neq b \neq c$ ), а два угла одинаковы и равны  $90^\circ$ . Тригональной сингонии отвечают ребра одной и той же длины и одинаковые углы, но не равные  $90^\circ$ . Гексагональная сингония — специальный случай высокой симметрии, с двумя ребрами одинаковой длины и двумя углами, равными  $90^\circ$ . У всех стандартных элементарных ячеек, показанных на рис. 23.3 в каждой вершине находится атом, таких вершин восемь, и каждый, расположенный в вершине атом входит в состав восьми других элементарных ячеек, так что атом в вершине считается как один атом на элементарную ячейку. В примитивной элементарной ячейке (Р) атомы располагаются только в вершинах. Объемноцентрированная элементарная ячейка (І) имеет дополнительный атом в центре ячейки, что соответствует двум атомам на ячейку. В гранецентрированной ячейке (F) атомы располагаются в вершинах и в центрах граней. Атом каждой грани принадлежит

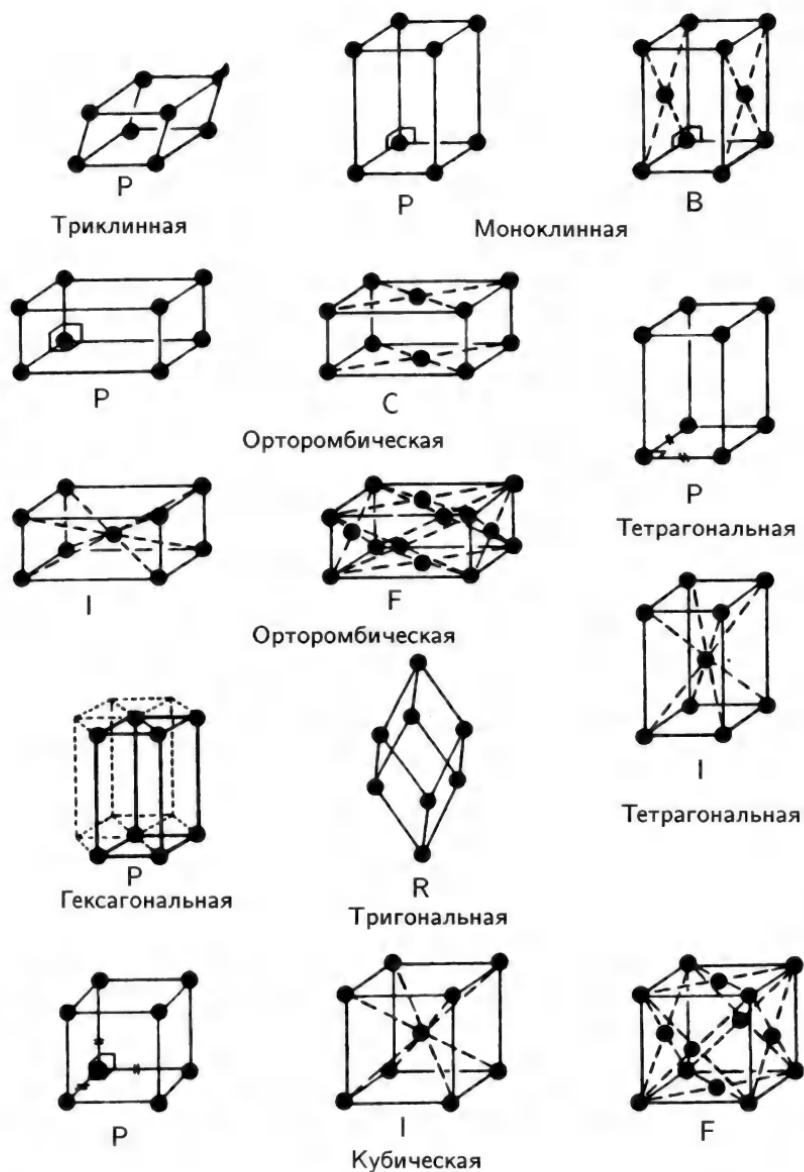


Рис. 23.3. Стандартные элементарные ячейки 14 решеток Браве, или пространственных решеток. (Из книги: G. Burns, Solid State Physics, Academic Press, New York, 1985, р. 24.)

Таблица 23.2. Характеристики стандартных кубических элементарных ячеек с постоянной решетки  $a$ , приведенных на рис. 23.3.

Характеристика	Примитивная (простая)	Объемно- центрированная	Гране- центрированная
Объем	$a^3$	$a^3$	$a^3$
Число узлов решетки	1	2	4
Число ближайших соседей	6	8	12
Расстояние между ближайшими соседями	$a$	$\frac{1}{2}\sqrt{3}a = 0,866a$	$a/\sqrt{2} = 0,707a$
Число вторичных ближайших соседей	12	6	6
Расстояние между вторичными ближайшими соседями		$\sqrt{2}a = 1,414a$	$a$
Коэффициент упаковки	$\pi/6 = 0,524$	$\sqrt{3}\pi/8 = 0,680$	$\sqrt{2}\pi/6 = 0,740$

двум элементарным ячейкам, а поскольку граней шесть, в этом случае имеется четыре атома на ячейку. Наконец, базоцентрированная ячейка, когда в одном случае центры располагаются на верхней и нижней гранях (С), а в другом на боковых гранях (В) с двумя атомами на элементарную ячейку. Некоторым кристаллическим системам (сингониям) соответствует два или большее количество таких типов кристаллических решеток, как показано на рис. 23.3 и в табл. 23.1. Эти 14 кристаллических типов называются решетками Браве. В табл. 23.2 представлены некоторые характеристики трех кубических решеток Браве. Приведенный в таблице коэффициент упаковки равен доле объема элементарной ячейки, занятой атомами.

## 7. ПЛОТНАЯ УПАКОВКА

Особенно важным свойством расположения атомов в твердых телах служит так называемая плотная упаковка. Наиболее эффективным способом покрытия плоской поверхности окружностями одного и того же размера является гексагональное расположение, схематически показанное на рис. 23.4. Эта наиболее плотная упаковка покрывает 90,7% ( $50\pi/\sqrt{3}$ ) поверхности и обеспечивает наибольшее число окружностей на единицу площади. В трех измерениях наи-

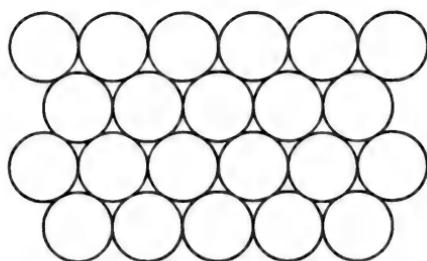


Рис. 23.4. Плотная упаковка окружностей по плоской поверхности.

более плотной упаковке соответствуют двумерные гексагональные слои, расположенные друг над другом таким образом, что атомы одного слоя располагаются между атомами слоев, лежащих выше и ниже этого слоя. Если третий слой находится непосредственно над первым, четвертый над вторым и т. д., то это соответствует схеме слоев А В А В А..., и кристалл имеет гексагональную плотно упакованную (ГПУ) структуру. Однако если третий слой расположен по-иному и не лежит над первым или вторым слоем, что соответствует схеме слоев А В С А В С А..., то возникает гранецентрированная кубическая (ГЦК) структура. Нелегко себе представить, что такая структура эквивалентна ГЦК. Сфера, упакованные по схемам ГЦК и ГПУ, занимают 74,0% ( $50\sqrt{2}\pi/3\%$ ) объема, что соответствует коэффициенту упаковки, приведенному в табл. 23.2.

Викофф перечисляет 32 элемента со структурами ГПУ, 30 элементов с ГЦК и 24 элемента с объемноцентрированной кубической (ОЦК) кристаллической решеткой. Кроме того, существуют несколько элементов со структурой, отвечающей более низкой симметрии, а также такие, как углерод и олово, имеющие при комнатной температуре несколько структур. В действительности структуры с плотной упаковкой нередко встречаются среди химических соединений, как и среди атомов в чистом виде. Например, рассмотрим соединения, образованные тремя атомами Al, Mg и O. Ионы кислорода  $O^{2-}$  имеют большие размеры, а металлические ионы  $Mg^{2+}$  и  $Al^{3+}$  — малые размеры, причем их ионные радиусы таковы:

$$\begin{array}{ll}
 Al^{3+} & 0,051 \text{ нм}, \\
 Mg^{2+} & 0,066 \text{ нм}, \\
 O^{2-} & 0,132 \text{ нм}.
 \end{array} \tag{28}$$

Кристаллический периклаз ( $\text{MgO}$ ) имеет идеальную упаковку атомов кислорода ГЦК, а их октаэдрические позиции заняты ионами магния также с упаковкой ГЦК. У кристаллического корунда  $\text{Al}_2\text{O}_3$  упаковка ионов кислорода отвечает слегка нарушенная ГПУ: ионы алюминия меньших размеров занимают две трети октаэдрических позиций между ионами кислорода. Кристаллическая решетка шпинели  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  имеет почти идеальную упаковку ионов кислорода ГЦК с ионами  $\text{Mg}$ , занимающими одну восьмую малых тетраэдрических позиций с четырьмя ионами кислорода в качестве ближайших соседей, и ионы алюминия занимают половину больших октаэдрических позиций с шестью ионами кислорода в качестве ближайших соседей.

## 8. ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ РЕШЕТКИ

Для определения кристаллической структуры необходимо задать базисные векторы элементарной ячейки  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  и  $\mathbf{c}$ , а затем найти координаты  $u$ ,  $v$ ,  $w$  всех атомов в этой ячейке. Например, положение  $i$ -го атома задается как

$$\mathbf{r}_i = u_i \mathbf{a} + v_i \mathbf{b} + w_i \mathbf{c}. \quad (29)$$

Знание базисных векторов означает, что известны их длины и углы или ориентации в пространстве. Они задают прямую или координатную пространственную решетку.

Прямой решетке соответствует обратная решетка с базисными векторами

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi \mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad \mathbf{B} = \frac{2\pi \mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \quad \mathbf{C} = \frac{2\pi \mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}. \quad (30)$$

Эти базисные векторы обладают свойством ортонормированности

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{A} &= \mathbf{b} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{C} = 2\pi, \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{B} &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

Представляют интерес векторы обратной решетки  $\mathbf{G}$ :

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + \ell\mathbf{C}, \quad (32)$$

где  $h$ ,  $k$ ,  $\ell$  — целые числа. Эти целые числа определяют кристаллографическую плоскость, и физический смысл вектора  $\mathbf{G}$  состоит в том, что обратная ему величина равна расстоянию  $d$  между  $hkl$ -плоскостями:

$$d_{hkl} = 2\pi/|\mathbf{G}|. \quad (33)$$

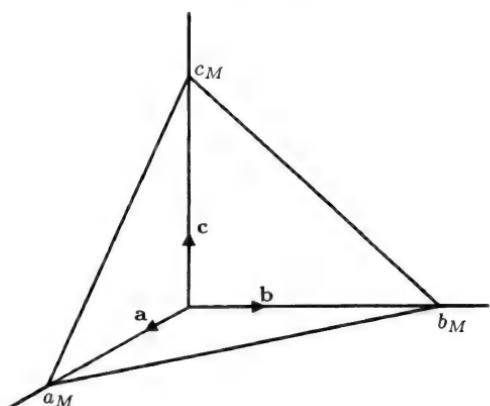


Рис. 23.5. Кристаллографическая плоскость  $(hkl)$  и ее точки пересечения  $a_M$ ,  $b_M$  и  $c_M$  с тремя координатными осями  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , соответственно. Миллеровские индексы  $h$ ,  $k$ ,  $l$  плоскости представляют собой минимальный набор целых чисел, пропорциональных соответственно обратным величинам  $1/a_M$ ,  $1/b_M$  и  $1/c_M$ .

Целые числа  $h$ ,  $k$ ,  $l$  называются миллеровскими индексами, и обратные им величины пропорциональны отрезкам  $a_M$ ,  $b_M$ ,  $c_M$  до точек пересечения соответствующих плоскостей  $(hkl)$  решетки с осями  $a$ ,  $b$  и  $c$ , как показано на рис. 23.5. Иными словами, отношения  $a_M : b_M : c_M$  совпадают с отношениями  $h^{-1} : k^{-1} : l^{-1}$ , а миллеровские индексы  $h$ ,  $k$ ,  $l$  представляют собой минимальный набор целых чисел, удовлетворяющих этим отношениям.

## 9. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Для определения кристаллической структуры используют отражение рентгеновских лучей, электронов или нейтронов атомными плоскостями кристаллических решеток, что позволяет найти расстояния между этими плоскостями и их ориентации. Падающий пучок с известным волновым вектором  $\mathbf{k}$ , отражаясь от кристалла, создает волну с волновым вектором  $\mathbf{k}'$ , измеряя который мы находим разность волновых векторов  $\Delta\mathbf{k}$ :

$$\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}'. \quad (34)$$

Когда эта разность  $\Delta\mathbf{k}$  равна вектору обратной решетки  $\mathbf{G}$  с целыми коэффициентами, определяемыми выражением (32), отражен-

ная волна  $\mathbf{k}'$  имеет большую интенсивность. Перемножив скалярно правые и левые части выражения (34), получим

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k'^2. \quad (35)$$

Поскольку отражение представляет собой упругое рассеяние без изменения длины волны, то  $k = k' = 2\pi/\lambda$ , и закон Брэгга в обозначениях вектора обратной решетки запишется в виде

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = 0. \quad (36)$$

Замечая, что угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{G}$  равен  $\pi/2 - \theta$  (рис. 23.6), и учитывая (33), закон Брэгга можно записать в более привычном виде

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (37)$$

Знак минус здесь опущен, поскольку  $\mathbf{G}$  и  $-\mathbf{G}$  представляют собой одинаковые векторы обратной решетки. Рис. 23.6 подтверждает это соотношение.

Если падающая волна представляет собой рентгеновские фотографии, то выражение для энергии

$$E = \hbar\omega = hc/\lambda \quad (38)$$

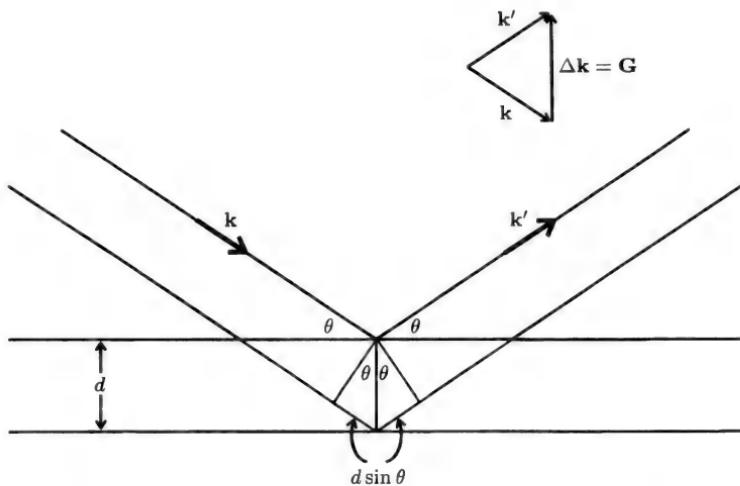


Рис. 23.6. Пучок рентгеновского излучения, падающий в направлении  $\mathbf{k}$ , отражается двумя параллельными плоскостями, расположенными на расстоянии  $d$  друг от друга; волновой вектор отраженной волны  $\mathbf{k}'$ , при чем  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ .

дает следующее соотношение между длиной волны (в нм) и энергией (в кэВ):

$$\lambda = 1,24/E \quad (\text{рентгеновские лучи}). \quad (39)$$

Кинетическая энергия электронного и нейтронного пучков равна

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar^2k^2/2m = h^2/2m\lambda^2. \quad (40)$$

Отсюда получаются следующие зависимости длины волны (нм) от энергии (в эВ):

$$\lambda = 1,2/\sqrt{E} \quad (\text{электроны}), \quad (41a)$$

$$\lambda = 0,028/\sqrt{E} \quad (\text{нейтроны}). \quad (42b)$$

## 10. ЯЧЕЙКА ВИГНЕРА—ЗЕЙТЦА

Нетрудно видеть, что 14 стандартных элементарных ячеек на рис. 23.3 исчерпывают все возможные кристаллические структуры. Однако имеются два обстоятельства. У каждой из них атомы располагаются в вершинах вместо единственного в середине, у семи непримитивных ячеек на ячейку приходится два или четыре атома. Для всех 14 решеток Браве существует способ построения примитивной, заполняющей пространство элементарной ячейки, называемой ячейкой Вигнера—Зейтца, которая содержит только один атом в центре, т. е. в выражении (29)  $u_i = v_i = w_i = \frac{1}{2}$ . Покажем, как можно построить такую ячейку в двух измерениях, а затем обобщим результат на три измерения.

Рассмотрим один атом косой двумерной решетки, схематически изображенной на рис. 23.7,а. От этого атома к каждому ближайшему соседнему атому проводится прямая линия, и в середине каждого отрезка строится перпендикуляр этому отрезку. В результате такого построения атом оказывается заключен в заполняющий пространство шестиугольник неправильной формы. Этот шестиугольник представляет собой примитивную элементарную ячейку двумерной косой решетки. На рис. 23.7,б показано аналогичное построение для соответствующей двумерной косой обратной решетки, причем две пары базисных векторов удовлетворяют выражениям (31)  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{B} = 2\pi$  и  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A} = 0$ .

Аналогичная процедура применима в трехмерном пространстве. От конкретного атома проводится прямая к ближайшему соседнему атому, и в середине отрезка перпендикулярно ему строится нормальная плоскость. Образованные таким образом плоскости заключают атом в заполняющий пространство многогранник, который и

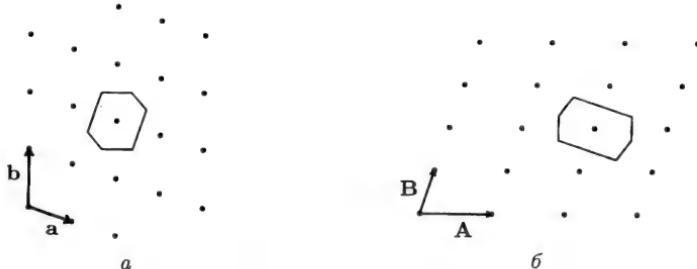


Рис. 23.7. *а* — построение элементарной ячейки Вигнера—Зейтца в двумерном координатном пространстве косой решетки с базисными векторами *а* и *б*; *б* — построение зоны Бриллюэна в соответствующей обратной решетке с базисными векторами *А* и *В*. Координатное пространство прямой решетки и *k*-пространство обратной решетки взаимны и связаны соотношениями (30) и (31).

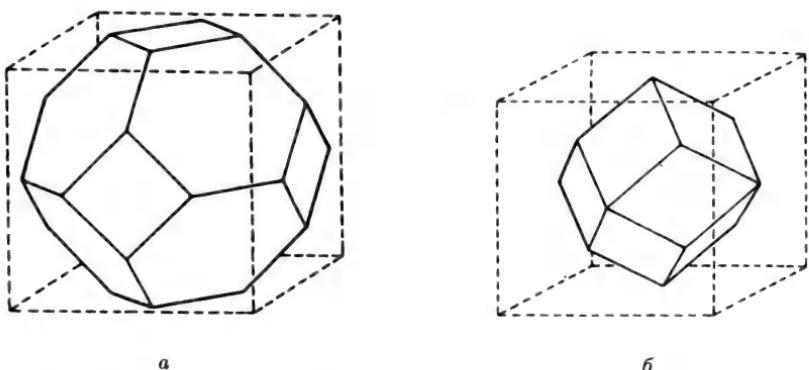


Рис. 23.8. Ячейка Вигнера—Зейтца в трехмерном координатном пространстве решетки ОЦК (*а*) и решетки ГЦК (*б*). Рисунки *а* и *б* представляют собой также зоны Бриллюэна, отвечающие соответственно решеткам ГЦК и ОЦК в координатном пространстве. (Из книги: *G. Burns, Solid State Physics*, Academic Press, New York, 1985, pp. 270, 271.)

является примитивной элементарной ячейкой трехмерной решетки. Ячейка Вигнера—Зейтца простой кубической решетки представляет собой также куб, в котором атомы расположены не в вершинах, а в центрах с координатами  $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$ . На рис. 23.8, *а* показан тетракаидекаэдр, в действительности усеченный правильный октаэдр, который представляет собой ячейку Вигнера—Зейтца ОЦК, а на рис. 23.8, *б*

приведена ячейка Вигнера—Зейтца ГЦК, имеющая вид ромбического додекаэдра.

Примитивная элементарная ячейка обратной решетки, образованная построением Вигнера — Зейтца, называется зоной Бриллюэна. На рис. 23.7, б показаны обратная решетка и зона Бриллюэна для двумерной косой решетки, изображенной на рис. 23.7, а. В трехмерном пространстве решетка, обратная прямой решетке ГЦК, представляет собой ОЦК, а обратная решетка прямой решетки ОЦК является решеткой ГЦК. Это означает, что на рис. 23.8, а изображена ячейка Вигнера—Зейтца прямой решетки ОЦК и что она совпадает с изображением зоны Бриллюэна, соответствующей прямой решетке ГЦК. Аналогичное утверждение можно сделать относительно рис. 23.8, б.

## 11. ФОНОНЫ И ДРУГИЕ ЧАСТИЦЫ

В гл. 4 и 8 мы рассматривали колебания кристаллической решетки. В этих колебаниях могут участвовать либо отдельные молекулы или группы атомов, либо большое число атомов, колеблющихся когерентно. Локализованные колебания решетки, называемые фононами, могут распространяться в твердых телах, при этом отражаясь и преломляясь. В твердых телах с ионной связью для фононов, связанных с колеблющимися в фазе положительными и отрицательными зарядами, характерны низкие частоты, и эти фононы называются акустическими. Когда же положительные и отрицательные заряды колеблются в противофазе, фононам отвечают высокие частоты, и эти фононы называются оптическими. Фононы могут быть также связаны с продольными и поперечными колебаниями атомов. Землетрясения можно локализовать по времени появления продольных, поперечных и поверхностных фононов, называемых сейсмическими волнами, которые распространяются с различными скоростями.

Поперечные оптические фононы и электромагнитные волны могут взаимодействовать друг с другом, и квант связанного фотон-фононного поля называется поляритоном.

В электрическом проводнике имеется остаток положительных ионов и свободные электроны, движущиеся в этом остатке. Возникает плазма с одинаковой концентрацией положительных и отрицательных зарядов, по крайней мере один из типов которых подвижен. Электроны плазмы могут колебаться, и плазменные колебания, или волны плотности заряда, представляют собой коллективное возбуж-

ждение электронного газа. Существует характерная плазменная частота  $\omega_p$ , определяемая выражением

$$\omega_p^2 = ne^2/\varepsilon m, \quad (42)$$

где  $n$  — концентрация электронов. Падающие электромагнитные волны будут отражаться, если их частота меньше  $\omega_p$ , а в случае  $\omega > \omega_p$  они будут распространяться дальше. Этим объясняются отражательная способность металлов в видимой области спектра и их прозрачность в ультрафиолетовом диапазоне. Квант плазменных колебаний называется плазмоном и может проявлять свойства частицы.

Электрон, движущийся относительно положительных ионов, поляризует близлежащие атомы и деформирует расположенную в его окрестности решетку. Электрон вместе с создаваемым им за счет поляризации полем деформированной кристаллической решетки ведет себя как подвижная частица, называемая поляроном.

Связанные электрон и дырка (положительный заряд, обусловленный отсутствующим электроном) составляют единое целое — частицу, называемую экситоном Ванье — Мотта. Эта электрические нейтральная «частица» обладает спектром уровней водородоподобного атома  $E_n$ , однако в полупроводниках энергии оказываются значительно меньше из-за высокой абсолютной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  и малой эффективной массы  $m^*$ :

$$E_n = -\frac{m^*/m_0}{(\varepsilon/\varepsilon_0)^2} \frac{E_0}{n^2}. \quad (43)$$

Здесь  $m_0$  — масса свободного электрона, а  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная. Энергия основного состояния атома водорода равна  $E_0 = -13,6$  эВ, а главное квантовое число  $n$  принимает значения  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ . У кремния и германия энергии экситона в основном состоянии ( $n = 1$ ) равны соответственно  $-14,7$  и  $-4,15$  мэВ. Боровский радиус атома водорода равен  $a_0 = 0,51\text{\AA}$ , а соответствующий радиус  $a_e$  экситона дается выражением

$$a_e = \frac{\varepsilon/\varepsilon_0}{m^*/m_0} a_0 \quad (44)$$

и существенно больше  $a_0$ . Экситон Ванье — Мотта может перемещаться по решетке, перенося энергию возбуждения с места на место.

Существует и другой тип экситона, называемый экситоном Френкеля и соответствующий возбужденному электронному состоянию отдельного атома, которое благодаря связи между соседними атомами может распространяться по кристаллической решетке,

перемещаясь от одного атома к другому. Это движение экситонов может носить характер распространения волн. Энергии состояний экситонов Френкеля обычно гораздо больше, чем у экситонов Ванье—Мотта.

## 12. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

Сверхпроводник — это вещество, которое обладает двумя характерными особенностями: оно имеет нулевое электрическое сопротивление и выталкивает из своего объема магнитное поле. Сверхпроводники проводят электрический ток без всякой диссипации энергии — свойство, которое может потенциально играть важную роль для передачи электроэнергии на большие расстояния, для накопления магнитной энергии и для создания электронных устройств, таких, как компьютеры, не потребляющих энергию.

Вещество становится сверхпроводником при температуре ниже критической  $T_c$ , называемой температурой перехода в сверхпроводящее состояние. До 1986 г. самая высокая температура  $T_c$ , достигнутая в 1973 г. для химического соединения  $\text{Nb}_3\text{Ge}$  типа A15, составляла 23,2 К. Открытие в 1986 г. Дж. Бедноржем и К. Мюллером высокотемпературной сверхпроводимости открыло новую эру в науке и технике, и десять лет спустя температура перехода поднялась до 133 К у соединения  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ , а при давлении 30 ГПа критическая температура оказалась равной 164 К. Стандартные сверхпроводники, такие, как  $\text{NbTi}$ , должны работать лишь при температуре жидкого гелия 4,2 К, что крайне дорого. Высокотемпературные сверхпроводники, с другой стороны, могут функционировать при температуре жидкого азота, что намного дешевле.

Сверхпроводник 1-го рода — идеальный диамагнетик, поскольку его магнитная восприимчивость  $\chi = -1$  и из выражения

$$B = \mu H = \mu_0(H + M) = \mu_0 H(1 + \chi) \quad (45)$$

следует, что намагниченность  $M = \chi H$  отрицательна и компенсирует внутреннее магнитное поле  $H$ , в результате чего магнитная индукция  $B$  обращается в нуль внутри вещества. Высокотемпературные сверхпроводники относятся ко 2-му роду, а это значит, что их электрическое сопротивление равно нулю, однако их восприимчивость, хотя и отрицательна, но не равна  $-1$ , т. е. они лишь частично выталкивают магнитное поле. Магнитный поток может присутствовать в них в виде вихрей или трубок вещества, находящегося в нормальном состоянии. Поток может составлять один квант маг-

нитного потока  $\Phi_0 = \hbar/2e = 2,068 \cdot 10^{-15}$  Тл · м<sup>2</sup> = 2,068 · 10<sup>-15</sup> Вб, который называется флюксоном. Выталкивание магнитного поля приводит к тому, что сверхпроводник отталкивает магниты и любые магнитные поля вблизи него. Это свойство вызывает левитацию магнитов с помощью сверхпроводников. Когда-нибудь это обеспечит движение без трения поездов, парящих над полотном дороги.

Носителями тока в сверхпроводниках являются спаренные электроны, называемые куперовскими парами, и обычно их энергетическое состояние находится выше верхней границы нормальной зоны проводимости и отделено от нее запрещенной зоной  $E_g$ . У сверхпроводника имеется два характерных параметра длины — длина когерентности  $\xi$  и глубина проникновения  $\lambda_L$

$$\xi = \frac{2\hbar V_F}{\pi E_g}, \quad \lambda_L = \left( \frac{m_e}{\mu_0 n_s e^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (46)$$

где  $V_F$  — скорость Ферми и  $n_s$  — концентрация куперовских пар. На поверхности раздела нормального металла и сверхпроводника величина  $n_s$  возрастает от нуля на границе до своего значения внутри сверхпроводника на глубине, определяемой длиной когерентности  $\xi$ . Внешнее магнитное поле проникает в сверхпроводник 1-го рода на расстояние  $\lambda_L$ . Вещество является сверхпроводником 1-го рода, если  $(\lambda_L/\xi) < 1/\sqrt{2}$ , и сверхпроводником 2-го рода, если  $(\lambda_L/\xi) > 1/\sqrt{2}$ .

При создании обычных электромагнитов, обеспечивающих магнитные поля свыше примерно 2 Тл, возникают трудности, а с помощью магнитов на основе высокотемпературных сверхпроводников можно в принципе достичь магнитных полей, на два порядка более сильных. Главные технологические трудности, которые надо преодолеть для достижения этой цели, связаны с улучшением эластичности материала сверхпроводников и с необходимостью увеличения электрического тока, который сможет протекать по сверхпроводникам, не переводя их в нормальное состояние.

# ПРОВОДИМОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

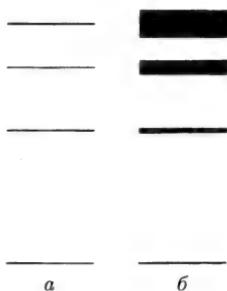
---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Ширина энергетических уровней атома весьма мала; в веществе взаимодействие между атомами приводит к расщеплению уровней внешних электронов и образованию зон, как показано на рис. 24.1. Рентгеновское излучение атомов в твердых телах, связанное с переходами на внутренних оболочках  $K$  и  $L$  ( $n = 1, 2$ ), характеризуется узкими спектральными линиями, поскольку внутренние оболочки соседних атомов хорошо экранированы друг от друга и не образуют зон. Электропроводность твердых тел обусловлена структурой зон внешних электронов. Если внешняя зона полностью заселена, то она образует валентную зону, и электроны в ней не могут служить носителями тока. Если к тому же следующая зона, называемая зоной проводимости, далеко отстоит от валентной зоны, т. е.  $E_g \gg k_B T$ , и не может быть заселена в результате теплового возбуждения, то вещество является диэлектриком. Вещество оказывается проводником, когда зона проводимости частично заполнена делокализованными электронами. Если показанная на рисунке запрещенная зона  $E_g$  сравнима по ширине с  $k_B T$ , то часть электронов из заполненной валентной зоны сможет перейти в пустую зону проводимости; такое вещество представляет собой беспримесный полупроводник. Если в такое вещество ввести примеси, стимулирующие переходы в зону проводимости, то его электропроводность может существенно увеличиться.

В качестве примера рассмотрим хлористый натрий  $\text{NaCl}$ , в котором атом натрия передает свой валентный электрон хлору





**Рис. 24.1.** Превращение уровней энергии отдельных атомов (a) в энергетические зоны (b) при сближении атомов.

ионы  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^+$  имеют целиком заполненные оболочки, валентная зона тоже целиком заполнена, а зона проводимости отделена от нее широкой энергетической щелью, так что это вещество является диэлектриком. С другой стороны, у металлического натрия решетка состоит из ионов  $\text{Na}^+$ ; помимо электронов, целиком заполняющих внутренние оболочки и валентные зоны ионов натрия, существуют делокализованные (свободные) электроны, возникающие вследствие ионизации (1a) и частично заполняющие зону проводимости; в результате натрий оказывается хорошим проводником.

Настоящая глава начинается с обзора основных положений электронной теории металлов, а затем в ней обсуждаются температурная и частотная зависимости электропроводности. Кратко будет упомянута связь явлений электропроводности и теплопроводности. Далее объясняются понятия поверхности Ферми и энергетических зон в  $k$ -пространстве; затем эти понятия будут использованы в теории проводников и полупроводников. В заключение показано, как эффект Холла позволяет почерпнуть полезную информацию о природе проводимости.

## 2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

Проще всего электронную проводимость металлов можно объяснить следующим образом: атомы металла теряют свои валентные электроны, которые свободно движутся в образовавшейся таким образом решетке из положительных ионов — катионов. Число электронов проводимости в единице объема металла с плотностью  $\rho$ ,

массовым числом  $A$  и валентностью  $Z$  дается равенством

$$n = N_A Z \rho / A, \quad (2)$$

где  $N_A$  — постоянная Авогадро. Типичные значения числа электронов в металлических проводниках ( $8,47 \cdot 10^{28} \text{ м}^3$  для меди) более чем в тысячу раз превосходит число молекул в таком же объеме газа при комнатной температуре ( $2,7 \cdot 10^{25} \text{ м}^3$ ).

Простейшее объяснение явления электропроводности дает модель Друде, в которой делаются следующие допущения о свойствах электронов проводимости:

1. Электроны не взаимодействуют с катионами решетки (приближение свободных электронов) за исключением упругих столкновений с ними, происходящих в среднем  $1/\tau$  раз в секунду и приводящих к мгновенному хаотичному изменению направления движения (приближение времени релаксации).
2. Столкновения электронов поддерживают их в тепловом равновесии, подчиняясь статистике Максвелла—Больцмана (приближение классической статистики).
3. Электроны не взаимодействуют между собой (приближение свободных электронов).

На основе этой модели удается предсказать большинство основных особенностей электропроводности, однако она оказывается не в состоянии объяснить такие эффекты, как образование запрещенных интервалов энергии и туннелирование.

В более совершенных теориях металлов ослабляется или вообще отбрасывается одно (или несколько) из приведенных ограничений. Как правило, отказываются от приближения свободных электронов и считают, что электроны движутся в периодическом потенциале, обусловленном электрическим полем ионов решетки. Отказ от приближения классической статистики обычно связан с признанием того факта, что электроны подчиняются статистике Ферми—Дираха со следующей функцией распределения по скоростям  $f_0(\mathbf{v})$ :

$$f_0(\mathbf{v}) = \frac{1}{\exp \left[ \left( \frac{1}{2} m v^2 - \mu \right) / k_B T \right] + 1}, \quad (3)$$

где  $\mu$  — так называемый химический потенциал, численно совпадающий с работой по удалению одного электрона из системы. Говорят, что подчиняющиеся статистике Ферми—Дираха не взаимодействующие электроны проводимости образуют ферми-газ.

В рамках релаксационного приближения считается, что функция распределения по скоростям  $f(\mathbf{v}, t)$  явно зависит от времени,

и при возникновении возмущения она возвращается из-за столкновений электронов к своему равновесному виду  $f_0$  с постоянной времени  $\tau$  в соответствии с уравнением

$$\frac{df}{dt} = \frac{f(t) - f_0}{\tau}. \quad (4)$$

Время релаксации  $\tau$  обычно считается не зависящим от скорости, так что возврат к состоянию равновесия описывается просто экспонентой  $e^{-t/\tau}$ . В рассматриваемых системах  $f(\mathbf{v}, t)$  всегда близка к равновесной функции распределения (3).

### 3. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

Если между концами металлического проводника приложена разность потенциалов, то внутри него возникает однородное электрическое поле  $E$ , электроны начинают двигаться с ускорением

$$-eE = m(dv/dt) \quad (5)$$

под действием силы  $F = -eE$ . За время  $t$ , равное по порядку величины промежутку времени  $\tau$  между двумя последовательными столкновениями, электрон приобретает скорость

$$v = -(eE/m)\tau. \quad (6)$$

Движение электронов представляет собой интервалы ускоренного движения, прерываемые столкновениями. Можно считать, что при каждом столкновении, предшествующем началу нового интервала ускоренного движения, скорость электрона уменьшается в среднем до нуля.

Для плотности тока  $J$  можно написать

$$J = ne\langle v \rangle = (ne^2\tau/m)E; \quad (7)$$

здесь считается, что средняя скорость электрона  $\langle v \rangle$  определяется соотношением (6). В случае постоянного тока электропроводность  $\sigma_0$  определяется законом Ома

$$J = \sigma_0 E, \quad (8)$$

а обратная электропроводности величина — удельное сопротивление  $\rho_0$  — соотношением

$$\sigma_0 = 1/\rho_0 = ne^2\tau/m. \quad (9)$$

Типичные значения удельного сопротивления металлов при комнатной температуре лежат в пределах от  $1,5 \cdot 10^{-6}$  до  $2,0 \cdot 10^{-5}$  Ом·см, а для меди, серебра и золота — в интервале от  $1,5 \cdot 10^{-6}$  до  $2,0 \cdot 10^{-6}$  Ом·см.

Удельное сопротивление высокотемпературных сверхпроводников при нормальных условиях составляет от  $3,0 \cdot 10^{-4}$  до  $10^{-2}$  Ом · см, полупроводников — от  $10^{-2}$  до  $10^9$  Ом · см, а диэлектриков — от  $10^{14}$  до  $10^{22}$  Ом · см, соответственно.

#### 4. ПЕРЕМЕННЫЙ ТОК

Находясь в переменном электрическом поле, изменяющемся по гармоническому закону  $E = E_0 e^{-i\omega t}$ , электроны проводимости будут испытывать ускорение в противоположных направлениях в зависимости от смены в каждом цикле знака  $E$ . Они также будут испытывать случайные столкновения, разделенные в среднем интервалом времени  $\tau$ . Эти столкновения прерывают колебательное движение электронов, и их можно учесть введением в уравнение (5) диссипативного члена  $p/\tau$ :

$$d\mathbf{p}/dt + \mathbf{p}/\tau = -e\mathbf{E}, \quad (10)$$

где  $p = mv$  — импульс электрона, изменяющийся по тому же гармоническому закону:  $p = mv_0 e^{-i\omega t}$ ; подставляя это соотношение в уравнение (10) и разрешая последнее относительно скорости  $v_0$ , получим

$$v_0 = \frac{-eE_0}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}. \quad (11)$$

Сопоставляя это выражение с (7) и (9) и учитывая, что роль  $\langle v \rangle$  здесь играет  $v_0$ , находим для электропроводности  $\sigma(\omega)$ :

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}. \quad (12)$$

Это соотношение переходит в выражение для электропроводности в случае постоянного тока  $\sigma(\omega) = \sigma_0$ , когда частота  $\omega$  обращается в нуль.

В области низких частот  $\omega\tau \ll 1$  за один период колебаний электрического поля  $E$  происходит много столкновений, так что движение электрона в среднем следует за изменением поля и  $\sigma(\omega) \sim \sigma_0$ . С другой стороны, в области высоких частот  $\omega\tau \gg 1$  между последовательными столкновениями укладывается много периодов колебаний поля; электропроводность в этой ситуации оказывается почти чисто мнимой, что отвечает случаю реактивного импеданса. В области СВЧ частота столкновений становится несущественной и электронный газ ведет себя подобно плазме, т. е. электрически нейтральному ионизованному газу, в котором роль отрицательных

зарядов играют подвижные электроны, а положительных — неподвижные ионы решетки. Электромагнитные волновые процессы могут быть описаны в терминах зависящей от частоты диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right), \quad (13)$$

где  $\omega_p$  — плазменная частота,

$$\omega_p = (ne^2/\epsilon_0 m)^{1/2}. \quad (14)$$

Эта частота характерна для электронов проводимости. Ее физический смысл состоит в том, что на частотах ниже плазменной частоты  $\omega_p$  диэлектрическая проницаемость отрицательна и распространение электромагнитных волн невозможно, а на частотах выше плазменной диэлектрическая проницаемость положительна, и происходит распространение электромагнитных волн. Вследствие этого металлы непрозрачны на частотах излучения  $\omega < \omega_p$  и, наоборот, прозрачны, при  $\omega > \omega_p$ .

## 5. УДЕЛЬНОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ

При движении в металле электроны проводимости испытывают рассеяние не только в результате столкновений с фононами, но также из-за дефектов решетки, присутствия примесных атомов и других причин, по которым кристаллическая структура может отличаться от идеальной. Дефекты кристаллической структуры и включения создают не зависящий от температуры вклад в удельное сопротивление, ограничивающий электропроводность металлов.

Согласно эмпирическому правилу Маттиссена общее сопротивление металлического образца  $\rho(T)$  складывается из сопротивления  $\rho_{ph}(T)$ , обусловленного рассеянием на тепловых колебаниях решетки (фононах), и сопротивления  $\rho_0$ , связанного с присутствием примесных атомов и других дефектов кристаллической решетки:

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_{ph}(T). \quad (15)$$

При высоких температурах член  $\rho_{ph}(T)$  пропорционален температуре  $T$  в первой степени, а при низких —  $T^5$  в соответствии с законом Блоха. При температурах вблизи и выше комнатной влияние примесей и дефектов решетки пренебрежимо мало, так что удельное сопротивление металлов примерно пропорционально температуре

$$\rho(T) \approx \rho(300K)[T/300] \quad T > 250K. \quad (16)$$

При температурах существенно ниже дебаевской температуры применим закон Блоха  $T^5$ , так что

$$\rho(T) = \rho_0 + AT^5 \quad T \ll \Theta_D. \quad (17)$$

Из соотношений (16) и (17) видно, что сопротивление металлов растет с температурой, т. е. их проводимость улучшается при понижении температуры. Напротив, удельное сопротивление полупроводников увеличивается с понижением температуры. Как объясняется в разд. 9, это связано с тем, что в полупроводниках п-типа электроны, перешедшие в зону проводимости вследствие теплового возбуждения, при понижении температуры  $T$  будут возвращаться обратно на свои места в атомах — донорах. В полупроводниках р-типа понижение температуры приводит к возврату в валентную зону электронов от атомов акцепторов. Оба процесса приводят к уменьшению числа подвижных носителей заряда, что влечет увеличение удельного сопротивления полупроводника при понижении температуры.

## 6. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

Если в металлическом образце имеется градиент температуры, движение электронов проводимости приводит к возникновению теплового потока в форме кинетической энергии от более нагретых участков тела к менее нагретым. В хороших проводниках, таких как медь или серебро, перенос тепла обусловлен тем же процессом рассеяния на фонах, который ответствен за электропроводность. Для типичных металлов в интервале температур от 273 до 373 К отношение  $k_{th}/\sigma T$ , где  $k_{th}$  ( $\text{Дж} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ ) и  $\sigma$  ( $\text{Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ ) — электронные теплопроводность и электропроводность, соответственно, примерно в два с половиной раза превосходит значение, предсказываемое законом Видемана—Франца

$$k_{th}/\sigma T = \frac{3}{2}(k_B/e)^2 = \quad (18)$$

$$= 1,11 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{Ом} \cdot \text{K}^{-2}, \quad (19)$$

где универсальная постоянная  $\frac{3}{2}(k_B/e)^2$  называется числом Лоренца<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Правильное значение числа Лоренца  $L = (\pi^2/3)(k_B/e)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{Ом} \cdot \text{K}^{-2}$  следует из теории металлов Зоммерфельда. — Прим. перев.

## 7. ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ

Электроны проводимости подчиняются статистике Ферми—Дирака с функцией распределения (3); выразив  $f$  через энергию  $E$ , получим

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}. \quad (20)$$

График этой функции приведен в гл. 9 на рис. 9.3,а для температуры абсолютного нуля  $T = 0$  и на рис. 9.3,б—для температуры в интервале  $0 < T < T_F$ . Выражение

$$\mu \approx E_F = k_B T_F \quad (21)$$

связывает химический потенциал  $\mu$  с температурой Ферми  $T_F$ , значение которой обычно составляет около  $10^5 K$ . Для энергий ниже уровня Ферми  $E_F$  функция распределения  $f(\mathbf{v}) = 1$ , а для энергий выше энергии Ферми  $E_F$ :  $f(\mathbf{v}) = 0$ ; промежуточные значения функции распределения принимает лишь в области шириной порядка  $k_B T$  вблизи  $E_F$ , как показано на рис. 9.2,б.

Кинетическую энергию электрона можно представить в виде

$$E_K = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m = (\hbar^2/2m)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (22)$$

где  $p = \hbar k$ . Для определения уровней энергии в прямоугольной области с размерами  $L_x$ ,  $L_y$  и  $L_z$  заметим, что декартовы компоненты вектора  $\mathbf{k}$  могут принимать только дискретные значения  $2\pi m_x/L_x$  для  $x$ -компоненты, и аналогично для остальных компонент. Величины  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$  принимают целочисленные значения в интервале от 1 до  $L/a$ , где  $a$ — межатомное расстояние.

В одномерном случае энергия запишется в виде

$$E_k = \hbar^2 k_x^2/2m = E_0(k_x a/\pi)^2, \quad (23)$$

где  $E_0$ —энергия на границе первой бриллюэновской зоны  $k_x = \pm\pi/a$  (рис. 24.2)

$$E_0 = (\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2). \quad (24)$$

Энергию удобно выразить через значения  $k_x$

$$-\pi/a \leq k_x \leq +\pi/a, \quad (25)$$

лежащие в первой зоне Бриллюэна:

$$E_k = E_0(2n_x + k_x a/\pi)^2, \quad (26)$$

где  $n_x$  принимает значения

$$n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (27)$$

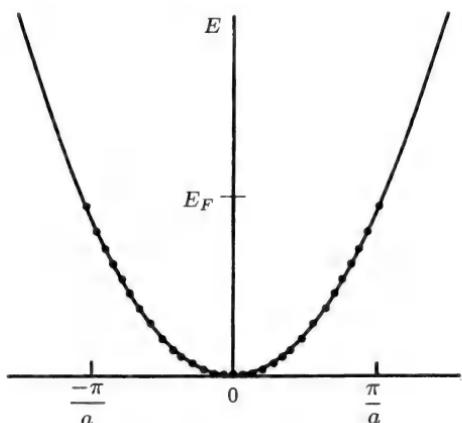


Рис. 24.2. Заполнение электронами уровней вплоть до уровня Ферми у границы первой зоны Бриллюэна  $k = \pm\pi/a$  (рассматривается одномерный случай). (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 9.)

При температуре абсолютного нуля все энергетические уровни (23) вплоть до уровня Ферми

$$E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m \quad (28)$$

полностью заселены, причем на каждом уровне находятся по два электрона с противоположными спинами (здесь опять рассматривается трехмерный случай). При ненулевой температуре частичная заселенность уровней имеет место лишь в узкой области шириной порядка  $k_B T$  вблизи  $E_F$ , как показано на рис. 9.3,б. Для простоты рассмотрим область кубической формы  $L_x = L_y = L_z = L$ ; поверхность Ферми в данном случае имеет форму шара, так что полное число электронов  $N$  определяется как

$$N = 2 \frac{\text{Объем области фазового пространства}}{\text{Фазовый объем, приходящийся на один электрон}} = 2 \frac{4\pi k_F^3 / 3}{(2\pi/L)^3}. \quad (29)$$

Плотность электронов  $n = N/v = N/L^3$  при  $E = E_F$  составляет

$$n = k_F^3 / 3\pi^2 = \frac{1}{3\pi^2} (2mE_F/\hbar^2)^{3/2}, \quad (30)$$

а плотность состояний  $D(E)$ , приходящихся на единицу объема, оцениваемая как производная  $dn/dE$  от плотности, в которой

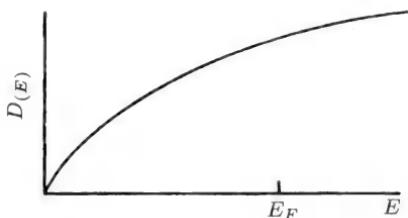


Рис. 24.3. Плотность состояний в вырожденном электронном газе (трехмерный случай) (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 10.)

$E = E_F$ , есть

$$D(E) = \frac{d}{dE}n(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m/\hbar^2)^{2/3} E^{1/2} = D(E_F)[E/E_F]^{1/2}. \quad (31)$$

Этот результат схематично изображен на рис. 24.3. В изотропном случае, когда поверхность Ферми является сферой, плотность состояний вблизи уровня Ферми можно представить с помощью соотношений (30) и (31) в любой из нижеприведенных форм

$$D(E_F) = \begin{cases} 3n/2k_B T_F \\ mk_F/\hbar^2 \pi^2. \end{cases} \quad (32)$$

Следует, однако, иметь в виду, что сказанное выше несправедливо для многих типов проводников, включая высокотемпературные сверхпроводники при  $T > T_{\text{кр}}$ , когда  $D(E)$  имеет более сложный вид.

Плотность  $n$  удобно выразить через полную энергию электронов  $E_{\text{полн}}$  с помощью следующих интегралов по энергии:

$$n = \int D(E)f(E) dE, \quad (33)$$

$$E_T = \int D(E)f(E) E dE. \quad (34)$$

Произведение  $D(E)f(E)$ , стоящее в подынтегральных выражениях, показано в зависимости от энергии на рис. 24.4,а при  $T = 0$  и на рис. 24.4,б в интервале температур  $0 < T \ll T_F$ .

Выражение для кинетической энергии свободного электрона (22) получено на основе решения уравнения Шредингера в виде плоской волны  $\phi = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$

$$-(\hbar^2/2m)\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}), \quad (35)$$

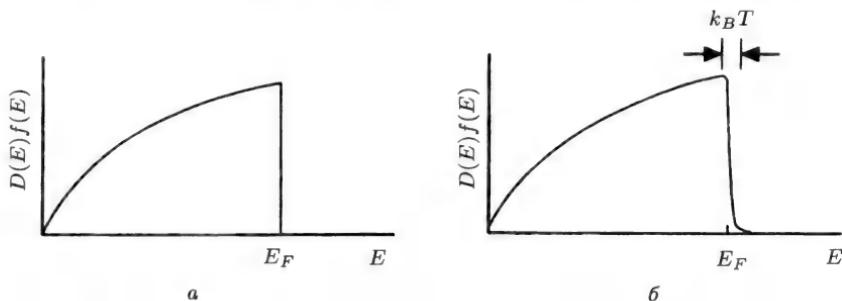


Рис. 24.4. Зависимость заселенности состояний от энергии вырожденного (а) и почти вырожденного (б) электронного газа. (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 10.)

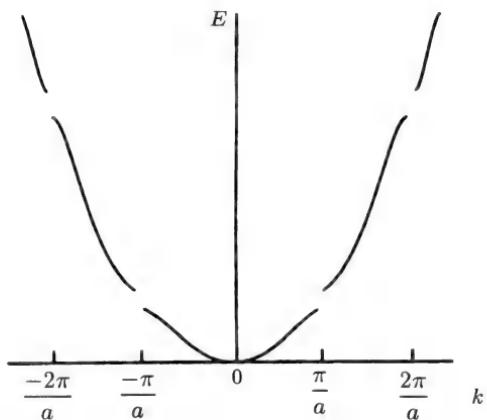


Рис. 24.5. Закон дисперсии для одномерного движения электрона в слабом периодическом поле. Запрещенные интервалы возникают на границах бриллюэновских зон  $k = \pm n\pi/a$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 11.)

в котором потенциальная функция  $V(\mathbf{r})$  положена равной нулю. При отличном от нуля потенциале в законе дисперсии для одномерного движения электрона образуются запрещенные интервалы (зоны), как показано на рис. 24.5 и рис. 24.8, а (ср. с энергетическим спектром свободного электрона, показанным на рис. 24.2). Запрещенные интервалы энергии возникают на границах  $k = \pm \pi/a$  элементарной ячейки обратной решетки, называемой первой зоной

Бриллюэна, а также на границах последующих зон Бриллюэна. По мере приближения к запрещенным зонам расстояние между соседними энергетическими уровнями уменьшается, т. е. плотность состояний  $D(E)$  увеличивается, как показано на рис. 24.6 и рис. 24.7. Из этих рисунков видно, что при слабом потенциале  $V \ll E_F$  плотность состояний вдали от краев запрещенных зон мало чем отличается от плотности состояний свободного электрона. При образовании запрещенных зон число энергетических уровней, т. е. число точек в  $k$ -пространстве, остается постоянным, меняется только плотность состояний  $D(E)$ .

Если для кинетической энергии вблизи запрещенной зоны использовать выражение для свободного электрона

$$E_K = \hbar^2 k^2 / 2m^* \quad (36)$$

то, дифференцируя  $E_K$  по  $k$ , можно оценить скорость электрона  $v = \hbar k / m^*$  в этой области

$$v = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{dE_K}{dk} \right)_{E_F}; \quad (37)$$

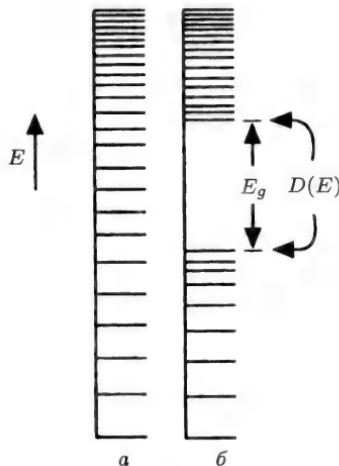


Рис. 24.6. Уровни энергии свободного электрона (a) и электрона в слабом периодическом поле (б) при наличии запрещенных зон, показанных на рис. 24.5. (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 11.)

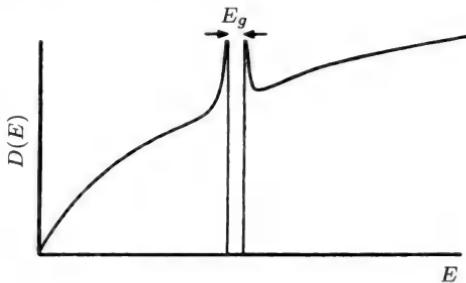


Рис. 24.7. Зависимость от энергии плотности состояний  $D(E)$  в окрестности запрещенной зоны, рис. 24.6. (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 11.)

дифференцируя еще один раз, получим эффективную массу  $m^*(k)$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E_K}{dk^2} \right)_{E_F}. \quad (38)$$

На рис. 24.8, б изображен модуль скорости электрона для энергетического спектра, показанного на рис. 24.8, а; оценить скорость можно непосредственно из графика 24.8, а, если известно поведе-

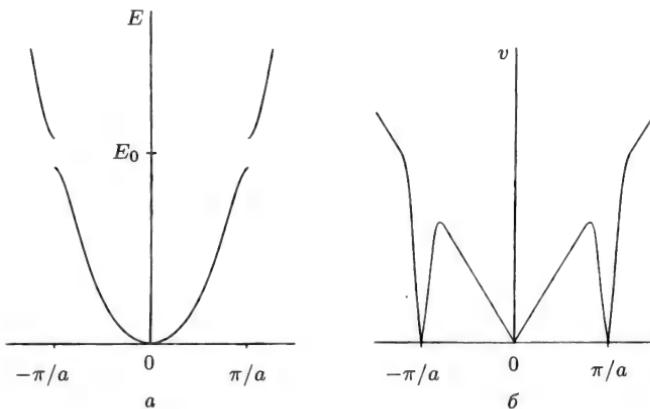


Рис. 24.8. Энергетический спектр (а) и модуль скорости  $v$  (б) электрона в функции  $k$  для модели, в которой параболический закон дисперсии иска- жается при образовании запрещенных зон на границах зоны Бриллюэна  $k = \pm \pi/a$ . Считается, что касательные к графику энергии в точках разрыва горизонтальны. Скорость  $v$  вычислялась графически на основании уравнения (37).

ние спектра на границах запрещенных зон вблизи уровня Ферми. Плотность состояний электрона на краях запрещенной зоны пропорциональна эффективной массе  $m^*$

$$D(E_F) = m^* k_F / \hbar^2 \pi^2 \quad (39)$$

и отличается от плотности состояний свободного электрона (32). Из рис. 24.8,б непосредственно видно, что для рассмотренного идеализированного случая переход через запрещенную зону сопровождается скачкообразным изменением эффективной массы от больших отрицательных значений к большим положительным; вдали от запрещенных зон закон дисперсии близок к параболическому.

## 8. ЗОНЫ В ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ

Показанные на рис. 24.2 и рис. 24.5 одномерные энергетические спектры просты и понятны. Трехмерные спектры весьма сложны и трудно представимы. Чтобы разобраться, в чем состоит эта трудность, рассмотрим энергетические зоны в простой квадратной двумерной решетке размером  $L \times L$ , в которой расстояние между атомами составляет  $a = L/10$ . На рис. 24.9 показана решетка в  $k$ -пространстве; площадь элементарной ячейки этой решетки составляет  $2\pi/L^2$ . Представляет интерес вычисление энергии на пути из точки  $\Gamma$  в центре в вершину угла  $M$ , затем в середину стороны  $X$ , и потом обратно в  $\Gamma$ , как показано на рис. 24.10.

В приближении свободных электронов полная энергия совпадает с кинетической:

$$E_K = E_0(a/\pi)(k_x^2 + k_y^2), \quad (40)$$

где  $E_0$  определена соотношением (24). Энергию следует выразить через величины  $k_x$  и  $k_y$  в первой зоне Бриллюэна

$$-\pi/a \leq k_x, k_y \leq +\pi/a \quad (41)$$

показанной на рис. 24.11. Используя форму записи, аналогичную соотношению (26), получим

$$E_K = E_0[(2n_x + k_x a/\pi)^2 + (2n_y + k_y a/\pi)^2], \quad (42)$$

где

$$n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (43)$$

В направлении  $\Gamma \Rightarrow X$ ,  $k_y = 0$ , и из соотношения (42) следует

$$E_K = E_0[(2n_x + k_x a/\pi)^2 + (2n_y)^2] \quad \Gamma \Rightarrow X, \quad (44a)$$

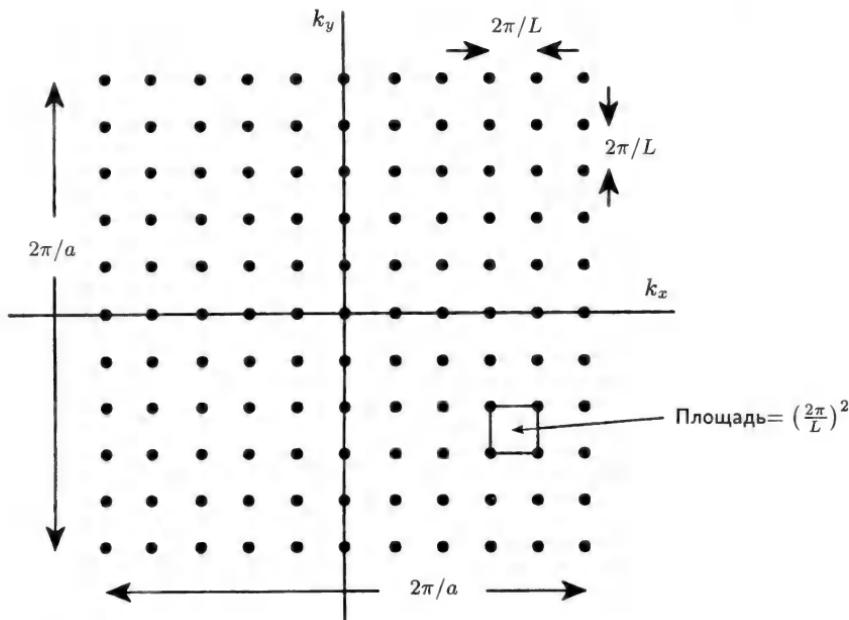


Рис. 24.9. Прямоугольная двумерная решетка в  $k$ -пространстве с  $L = 10a$ . (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 212.)

в направлении  $\Gamma \Rightarrow M$   $k_x = k_y$ , и (42) дает

$$E_K = E_0[(2n_x + k_x a/\pi)^2 + (2n_y + k_y a/\pi)^2] \quad \Gamma \Rightarrow M, \quad (44\text{a})$$

в направлении  $X \Rightarrow M$   $k_x = \pi/a$ , и из (42) вытекает

$$E_K = E_0[(2n_x + 1)^2 + (2n_y + k_y a/\pi)^2] \quad X \Rightarrow M. \quad (44\text{b})$$

Определяемые этими соотношениями зоны показаны на рис. 24.12 с указанием соответствующих значений  $(n_x, n_y)$ . В качестве упражнения читателю предоставляется самостоятельно идентифицировать зоны  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  в верхней части рисунка. Из этого рисунка, кстати, видно, что в точках симметрии  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $X$  зоны перекрываются.

В реальных веществах зоны на рис. 24.12 будут заполнены вплоть до уровня Ферми, а при энергиях выше  $E_F$  они будут оставаться свободными. Например, при  $E_F = 1,5E_0$  зона  $(0, 0)$  будет заполнена всюду, за исключением окрестности точки  $M$ , а зона

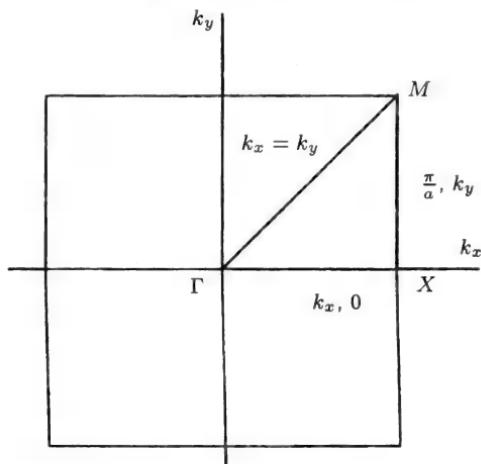


Рис. 24.10. Точки симметрии первой зоны Бриллюэна из рис. 24.9: центральная точка  $\Gamma$   $(0, 0)$ , вершина  $M$   $(\pi/a, \pi/a)$  и середина стороны  $X$   $(\pi/a, 0)$ . (Из книги: *C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity*, Academic Press, New York, 1995, p. 212.)

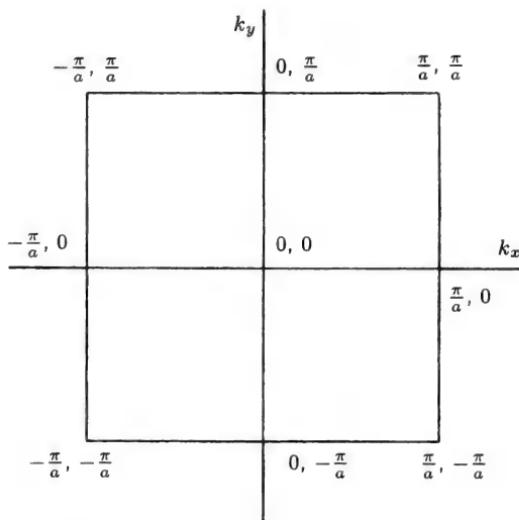


Рис. 24.11. Значения  $(k_x, k_y)$  в точках симметрии для зоны Бриллюэна, изображенной на рис. 24.10. (Из книги: *C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity*, Academic Press, New York, 1995, p. 211.)

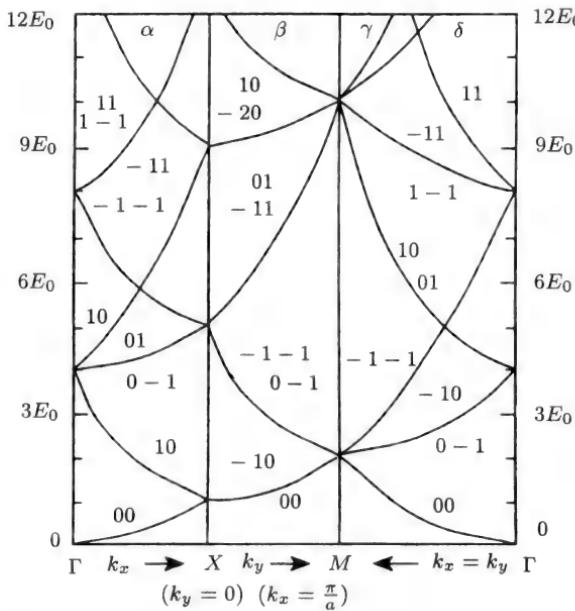


Рис. 24.12. Энергетические зоны в трех главных направлениях  $\Gamma \Rightarrow X$ ,  $X \Rightarrow M$  и  $M \Rightarrow \Gamma$  для квадратной решетки в приближении свободных электронов. Читателю предлагается самостоятельно идентифицировать зоны  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  в верхней части рисунка. (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 213.)

$(-1, 0)$  заполнена вплоть до энергии  $E = E_F$  в направлениях  $\Gamma \Rightarrow X$  и  $X \Rightarrow M$ . Остальные зоны останутся незаполненными.

Если учесть влияние периодического потенциала решетки, то на границах бриллюэновских зон на рис. 24.12 появятся запрещенные интервалы; они возникнут в точках  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $X$  пересечения зон различных направлений. Данное явление аналогично одномерному случаю, изображенному на рис. 24.5.

## 9. ПОЛУПРОВОДНИКИ

В предыдущем разделе уже говорилось, что в диэлектриках валентная зона полностью заполнена, а лежащая выше зона проводимости — пуста. В случае обычных диэлектриков Больцмановский фактор  $\exp(-\Delta E_g/k_B T)$  настолько незначителен, что число электронов, переходящих в зону проводимости, пренебрежимо мало.

У беспримесных полупроводников ширина запрещенной зоны  $\Delta E_g$  значительно меньше, так что в результате теплового возбуждения часть электронов переходит в зону проводимости, где они становятся носителями электрического тока. Кроме того, переходя из валентной зоны в зону проводимости, электрон оставляет за собой вакантное место, которое называется дыркой и ведет себя как положительный заряд. Дырка может перемещаться, поскольку расположенный поблизости электрон может занять образовавшееся вакантное место в валентной зоне, перемещая тем самым дырку к новой связи. Дырки ведут себя так, как если бы они были делокализованными зарядами. Делокализованные электроны в зоне проводимости и делокализованные дырки в валентной зоне являются носителями электрического тока, однако количество и тех и других невелико, так что суммарная электропроводность оказывается малой. В таком полупроводнике число дырок в валентной зоне совпадает с числом электронов в зоне проводимости, и его называют беспримесным.

Кремний (Si) и германий (Ge) являются полупроводниками. Оба этих элемента принадлежат IV группе периодической системы (рис. 21.4 в гл. 21), и их атомы имеют по четыре валентных электрона, участвующих в образовании химических связей с четырьмя соседними атомами кристаллической решетки. Если в кремний ввести в виде примеси элемент V группы, например фосфор (P), мышьяк (As) или сурьму (Sb), атомы которых имеют по пять валентных электронов, то примесный атом As израсходует четыре электрона на формирование четырех связей с ближайшими атомами решетки кремния, после чего у него останется еще один валентный электрон. Этот дополнительный электрон атома мышьяка находится на уровне в запрещенной зоне чуть ниже зоны проводимости, на расстоянии  $\Delta E_D$  от нее, как показано на рис. 24.13. Поскольку  $\Delta E_D/k_B T \ll 1$ , то большинство электронов с донорного уровня атомов мышьяка перейдут в зону проводимости и внесут вклад в электропроводность. Такие полупроводники относятся к n-типу, поскольку их электропроводность обусловлена электронами в зоне проводимости.

Когда кремний или германий легируются элементами III группы, например бором B, галлием Ga, или индием In, примесные атомы с тремя электронами во внешней оболочке отберут электрон из валентной зоны атома кремния для дополнения четвертой связи. В результате в валентной зоне образуется подвижная дырка, способная стать носителем электрического тока. На рис. 24.13 эта ситуация изображена как переход электрона на акцепторный

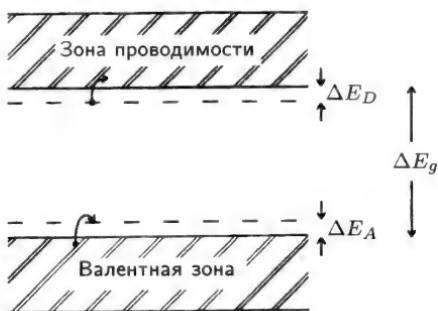


Рис. 24.13. Донорные ( $E_D$ ) и акцепторные ( $E_A$ ) уровни в запрещенной зоне  $\Delta E_g$  полупроводника, отделяющей валентную зону от зоны проводимости.

уровень примеси (например, галлия), расположенный на небольшом расстоянии  $\Delta E_A$  над верхним краем валентной зоны. Вероятность перехода электрона на акцепторный уровень велика, поскольку  $\Delta E_A/k_B T \ll 1$  и больцмановский фактор близок к единице  $\exp(-\Delta E_A/k_B T) \sim 1$ . Этот тип проводимости называется проводимостью р-типа, поскольку носителями тока являются положительные заряды (дырки), образующиеся в валентной зоне в результате перехода электронов на акцепторные уровни.

Избирательное легирование полупроводника донорными или акцепторными примесями позволяет добиться желаемой электропроводности. Хотя описанная выше собственная электропроводность полупроводника также дает некоторый вклад, в обычных условиях он будет почти незаметен на фоне проводимости р- и н-типов. Типичные значения ширины запрещенных зон и энергий примесных уровней приведены в табл. 24.1; использование этих данных

Таблица 24.1. Характеристики полупроводников.

	Энергия, эВ		Тип проводимости
	Кремний (Si)	Германий (Ge)	
$\Delta E_g$	1,12	0,67	Собственная
$\Delta E_D$ , фосфор, P	0,044	0,012	п-типа
$\Delta E_D$ , сурьма, Sb	0,039	0,010	п-типа
$\Delta E_A$ , бор, B	0,046	0,010	р-типа
$\Delta E_A$ , индий, In	0,16	0,011	р-типа

обеспечивает разработку полупроводниковых приборов с широким набором характеристик.

В реальных полупроводниках дело обстоит сложнее, поскольку положение зон в кристалле может зависеть от ориентации, так что приведенные в таблице величины будут изменяться в зависимости от направления. Однако картина явления кардинально не изменяется.

## 10. ЭФФЕКТ ХОЛЛА

Эффект Холла возникает в скрещенных электрическом и магнитном полях и может быть использован для определения подвижности и знака носителей заряда. Практическая схема измерений показана на рис. 24.14; магнитное поле  $B_0$  направлено по оси  $z$  перпендикулярно образцу, имеющему форму пластинки; электрическое поле  $E_y$  в направлении оси  $y$  вызывает электрический ток  $I = JA$  с плотностью  $J = nev$ . Сила Лоренца

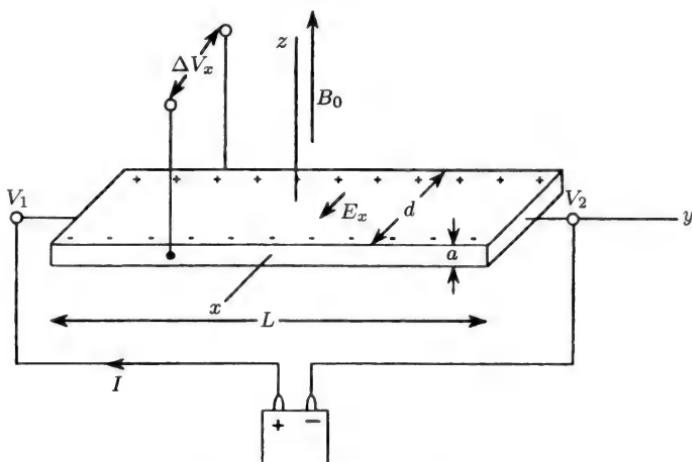


Рис. 24.14. Схема измерения эффекта Холла: в пластинке шириной  $d$  и толщиной  $a$ , находящейся в однородном поперечном магнитном поле  $B_0$ , течет электрический ток  $I$ . Показаны падение напряжения  $V_2 - V_1$  вдоль пластинки, разность потенциалов  $\Delta V_x$  и электрическое поле  $E_x$  поперек пластинки. Схема приведена для случая отрицательных носителей заряда (электронов). (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 18.)

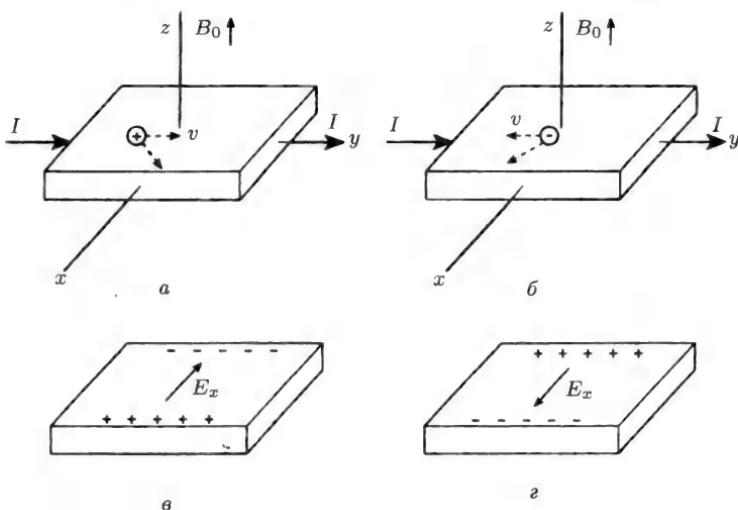


Рис. 24.15. Движение носителей заряда (вверху) и поперечное электрическое поле (внизу) в схеме измерения эффекта Холла на рис. 24.14. Положительные заряды (а) отклоняются и создают поперечное электрическое поле  $E_x$  (в). Соответствующее отклонение и результирующее поле в случае электронов показано на рисунках б и г, соответственно. (Из книги: C. P. Poole, Jr. et al., Superconductivity, Academic Press, New York, 1995, p. 19.)

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0 \quad (45)$$

действует в положительном направлении оси  $x$  со стороны магнитного поля как на положительные, так и на отрицательные электрические заряды  $q$ , движущиеся в направлении оси  $y$ , как показано на рис. 24.15, а и б, соответственно. Эта сила отклоняет заряды к краям пластинки, и в результате возникает электрическое поле  $E_x$ , перпендикулярное направлению электрического тока ( $y$ ) и магнитного поля ( $z$ ). Наведенное электрическое поле направлено против оси  $x$  для положительных зарядов  $q$  и вдоль оси  $x$  — для отрицательных, как показано на рис. 24.15, в и г, соответственно. В установившемся режиме сила  $qE_x$ , действующая на заряд со стороны наведенного электрического поля, уравновешивает силу Лоренца  $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0$ :

$$qE_x = qvB_0, \quad (46)$$

так что движение носителей заряда  $q$  в образце перестает отклоняться от прямолинейного.

Коэффициент Холла определяется как отношение

$$R_H = E_x / J_y B_0 \quad (47)$$

трех наблюдаемых физических величин. Подставляя в (47) соотношения (7)  $J = nev$  и (46), для дырок ( $q = e$ ) и электронов ( $q = -e$ ), получим, соответственно,

$$R_H = 1/ne \quad (\text{дырки}), \quad (48a)$$

$$R_H = -1/ne \quad (\text{электроны}), \quad (48b)$$

т. е. знак величины  $R_H$  определяется знаком заряда. Таким образом, эффект Холла отличает электроны от дырок, и если все носители заряда имеют одинаковый знак, описанная схема позволяет определить их плотность. Если в образце одновременно присутствуют и положительные, и отрицательные носители заряда, то происходит частичная или полная компенсация их вкладов в эффект Холла.

## ГЛАВА 25

---

# СТРОЕНИЕ ЯДРА

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 21, посвященной строению атомов, мы детально исследовали распределение электронов. Ядро же рассматривалось лишь как источник силы, удерживающей электроны. В этой главе речь пойдет о внутренней структуре ядра, состоящего из протонов и нейтронов, которые носят общее название нуклон. В следующей главе мы рассмотрим внутреннюю структуру самих нуклонов, которые построены из夸рков, а также другие элементарные частицы.

### 2. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Этот раздел посвящен четырем фундаментальным взаимодействиям и связанным с ними силам, которые обеспечивают существование окружающего нас материального мира, а также различным частицам вещества: атомам, электронам, атомным ядрам, нуклонам и夸ркам, образующим эти нуклоны.

Гравитационное взаимодействие — дальнодействующее (гравитационные силы пропорциональны  $1/r^2$ ) и слишком слабо, чтобы влиять на свойства атомов или ядер. На расстояниях менее 1 фм ( $1 \text{ фм} = 10^{-15} \text{ м}$ ) гравитация в  $10^{39}$  раз слабее «сильного», ядерного взаимодействия. Затем идут слабые взаимодействия, вызывающие взаимные превращения, которые при энергиях нейтронов и протонов 1 ГэВ составляют примерно  $10^{-6}$  от сильных. Эти силы рассматриваются в следующем разделе; они не играют важной роли в формировании характеристик ядер.

Сила электрического взаимодействия двух частиц с зарядами  $q$  и  $q'$  описывается известным законом Кулона

$$F_{EM} = qq'/4\pi\epsilon_0 r^2. \quad (1)$$

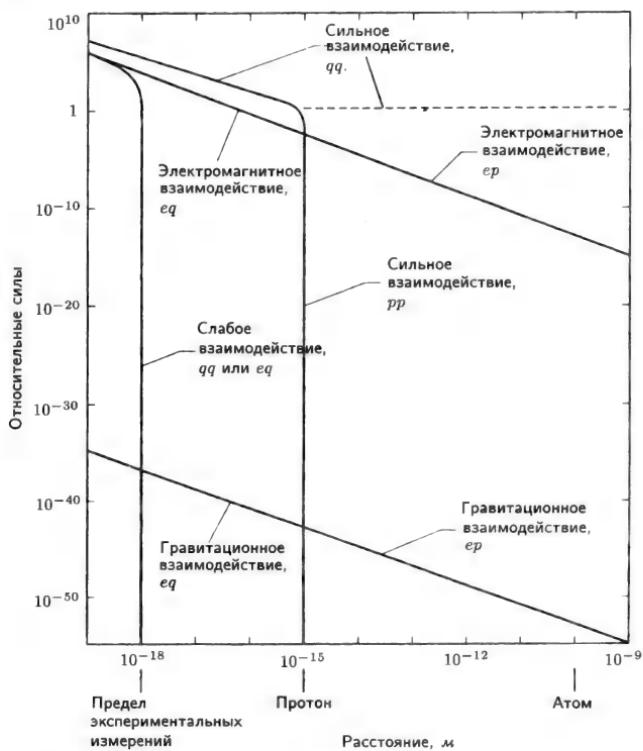


Рис. 25.1. Зависимость от расстояния относительной величины сил, связанных с четырьмя фундаментальными взаимодействиями и действующими между электронами ( $e$ ), протонами ( $p$ ) и кварками ( $q$ ). Пунктирная линия в верхней части рисунка соответствует притяжению двух кварков. (Из книги: J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$ . Wiley, New York, 1994, р. 27.)

Электрические силы подобно гравитационным являются дальнодействующими (и одинаково зависят от расстояния), однако они значительно мощнее последних. Отношение электрического и сильного взаимодействий определяется безразмерной постоянной тонкой структуры

$$\alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0\hbar c \approx 1/137. \quad (2)$$

Именно кулоновское притяжение отрицательно заряженных электронов к положительно заряженному ядру является силой, обеспечивающей устойчивую структуру атомов. Положительно заряжен-

ные протоны расталкиваются внутри ядра, противодействуя сильному взаимодействию, благодаря которому осуществляется связь между нуклонами. Это отталкивание служит причиной того, что более тяжелые атомы периодической системы элементов по мере роста атомного номера  $Z$  оказываются менее устойчивыми.

На рис. 25.1 проведено сравнение сил, отвечающих перечисленным фундаментальным взаимодействиям, и их зависимость от расстояния между взаимодействующими частицами. Если принять за единицу величину сильного взаимодействия находящихся в контакте протонов, то сила электрического отталкивания между ними составит  $1/137$ , а сила гравитационного притяжения — пренебрежимую величину порядка  $10^{-39}$ .

Сильные взаимодействия не влияют на электроны и не зависят от заряда частиц. Они примерно одинаковы для любой пары нуклонов (протон-протон, нейtron-нейtron, протон-нейtron). Легкие ядра обычно образуют изотопы с одинаковым числом протонов и нейтронов, поскольку кулоновское взаимодействие в них достаточно слабо и не оказывает существенного влияния. Ситуация существенно меняется в случае тяжелых ядер, у которых с ростом общего заряда ядра кулоновское отталкивание протонов становится все более и более мощным. У тяжелых ядер это кулоновское отталкивание частично компенсируется возрастанием отношения числа нейтронов к числу протонов, поскольку нейтроны не участвуют в кулоновском взаимодействии и, кроме того, наличие нейтронов отдаляет протоны друг от друга, тем самым ослабляя его. В конечном счете число протонов становится столь большим, что кулоновское отталкивание начинает преобладать (в результате чего большая часть элементов семейства актинидов оказывается радиоактивной) и препятствует существованию еще более тяжелых элементов.

### 3. РАЗМЕРЫ ЯДЕР

Все атомы имеют примерно одинаковые размеры, составляющие от 0,1 до 0,3 нм, т. е. 2–6 боровских радиусов. Исключение составляет водород, радиус которого  $a_0 = 0,053$  нм. Эта закономерность отчетливо прослеживается на графиках, иллюстрирующих зависимость плотности атомов в различных твердых телах от атомного номера  $Z$  атомов. Плотность электронов в атомах возрастает примерно в 100 раз при переходе от легких элементов к тяжелым.

В ядрах ситуация противоположна: все ядра имеют почти одинаковую плотность, вследствие чего радиус ядра определяется

формулой

$$R = 1,2A^{1/3}\text{фм}, \quad (3)$$

где  $A$  — массовое число, т. е. число нуклонов в ядре. Плотность нуклонов  $\rho_N$  составляет

$$\rho_N = A/(4\pi R^3/3) = 0,14 \text{ нуклон}/(\text{фм})^3. \quad (4)$$

При этом плотность нуклонов внутри ядра постоянна вплоть до  $0,7R$ , после чего приблизительно линейно спадает до нуля при  $1,3R$ . Размеры нуклонов (протонов и нейтронов) равны примерно 1 фм, что соответствует радиусу действия ядерных сил. Ядро можно представлять себе в виде совокупности «плотно упакованных» нуклонов, имеющей форму шара.

Считается, что нейтронные звезды представляют собой плотно упакованную нейтронную структуру, плотность которой сравнима с плотностью атомных ядер (4), а типичный радиус составляет несколько километров. Звезда должна быть достаточно небольшой, чтобы силы гравитационного притяжения не приводили к коллапсу и ее превращению в черную дыру. Это напоминает ситуацию с атомным ядром, которое должно быть достаточно мало, чтобы кулоновское отталкивание не развалило его на части. Таким образом, в ограниченных пределах более слабые дальнодействующие силы, обратно пропорциональные квадрату расстояния, могут доминировать над сильным взаимодействием.

Мы предполагали, что нуклоны распределены в ядре сферически симметрично. Во многих случаях, однако, распределение заряда в ядре имеет удлиненную или уплощенную форму, соответствующую вытянутым или сплющенным эллипсоидам, что демонстрирует наличие положительного или отрицательного электрического квадрупольного момента, соответственно. При этом, конечно, распределение заряда ядра обусловлено только протонами, но не нейтронами. Подобная картина соответствует представлениям классической физики. В квантовой механике для появления у ядра электрического квадрупольного момента необходимо, чтобы спин ядра был  $I > 1/2$ . Электрический дипольный момент у ядер отсутствует.

#### 4. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ

Энергия связи ядра  $E_B$  определяется как разность между энергией покоя составляющих его нуклонов и энергией покоя  $M_Nc^2$  самого ядра

$$E_B = Zm_pc^2 + (A - Z)m_nc^2 - M_Nc^2, \quad (5)$$

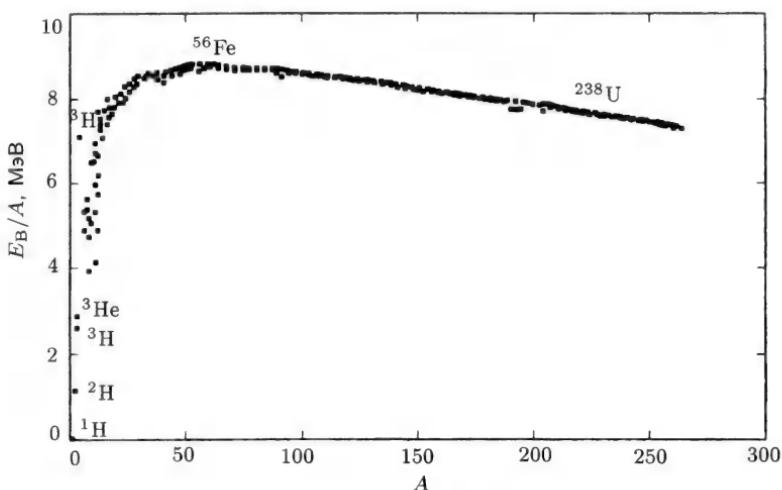


Рис. 25.2. Зависимость удельной связи от  $A$ . (Из книги: *J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$* , Wiley, New York, 1994, р. 302.)

где

$$m_p c^2 = 938,3 \text{ МэВ}, \quad (6a)$$

$$m_n c^2 = 939,6 \text{ МэВ}. \quad (6b)$$

Ядро гелия (альфа-частица) имеет  $Z = 2$  и  $A = 4$ , а его энергия покоя  $M c^2$  равна 3,7274 ГэВ, вследствие чего формула (5) дает для энергии связи значение 28,3 МэВ. Важную роль играет энергия связи, приходящаяся на один нуклон  $E_B/A$ . Характерные значения  $E_B/A$

$$\begin{aligned} 7,08 \text{ МэВ} &\text{ для } {}^4\text{He}, \\ 8,79 \text{ МэВ} &\text{ для } {}^{56}\text{Fe}, \\ 7,57 \text{ МэВ} &\text{ для } {}^{238}\text{U}. \end{aligned} \quad (7)$$

На рис. 25.2 представлена зависимость величины  $E_B/A$  от  $A$ , из которой видно, что наиболее стабильные ядра, т. е. те, которым соответствуют наибольшие значения  $E_B/A$ , лежат в диапазоне от  $A = 50$  до  $A = 65$  и что наиболее стабильным оказывается ядро железа  ${}^{56}\text{Fe}$ . Рисунок наглядно демонстрирует, что энергия может выделяться либо в результате слияния двух легких ядер в более тяжелое ядро, либо в результате деления тяжелого ядра на два более легких. При этом видно, что самые легкие ядра, такие как  ${}^2\text{H}$  и  ${}^3\text{He}$ , обладают особенно низкой энергией связи, благодаря чему сли-

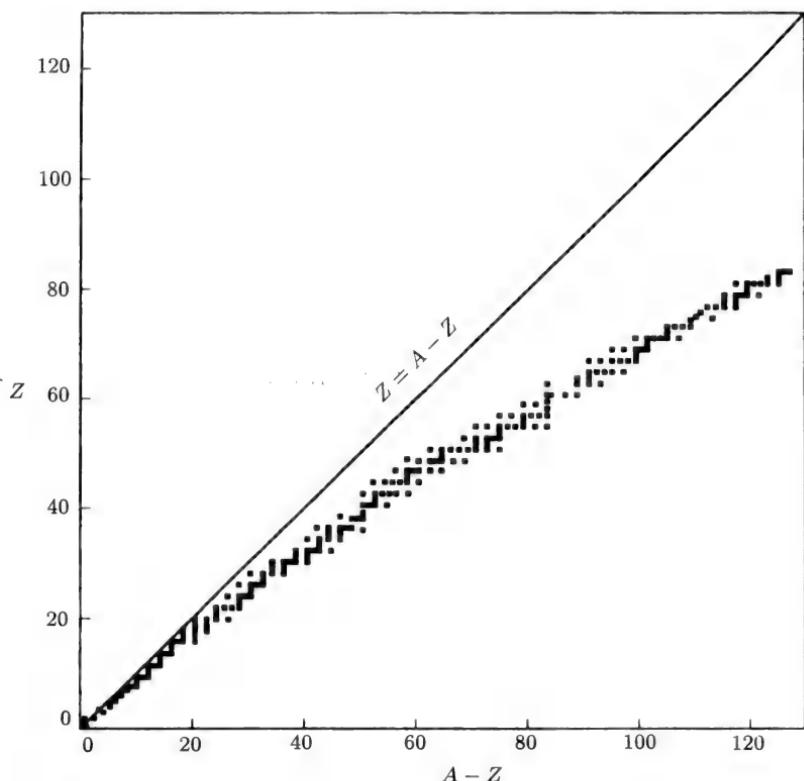


Рис. 25.3. Зависимость числа протонов  $Z$  от числа нейтронов  $(A - Z)$  в устойчивых ядрах. (Из книги: *J. W. Rohlfs, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$* , Wiley, New York, 1994, p. 302.)

жение этих ядер обеспечивает максимально эффективное выделение ядерной энергии.

Существует упрощенная модель ядра в виде сферической жидкой капли — ядерного вещества; в этом случае энергия связи пропорциональна разности между объемной энергией  $\alpha A$  и поверхностной энергией  $-\beta A^{2/3}$ , обусловленной неполной связью нуклонов на поверхности. Модель не вполне адекватна и требует учета дополнительных факторов. Наиболее важным фактором, уменьшающим устойчивость тяжелых ядер, является кулоновское взаимодействие, пропорциональное  $-q^2/r$  и приводящее к появлению члена  $-\gamma Z^2/A^{1/3}$ . Кроме того, имеется обусловленная принципом запрета

Паули тенденция к равенству числа протонов и нейтронов, а также к предпочтению четного числа нуклонов обоих типов (изотопический член). Учет этих факторов приводит к появлению в выражении для энергии связи двух дополнительных членов. В результате была получена полуэмпирическая формула для энергии связи (которую иногда называют формулой Вейцзеккера). В единицах МэВ эта формула имеет вид.

$$\frac{E_B}{A} = 15,75 - \frac{17,8}{A^{1/3}} - \frac{0,711Z^2}{A^{4/3}} - 23,7 \left\{ 1 - \frac{2Z}{A} \right\}^2 + \begin{vmatrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{vmatrix} \frac{11,18}{A^{3/2}}. \quad (8)$$

Последний член равен +1 для четно-четных ядер, 0 для четно-нечетных и нечетно-четных ядер, и -1 для нечетно-нечетных ядер. Выражение (8) хорошо описывает данные, приведенные на рис. 25.2, за исключением области самых легких ядер. Например, для трех ядер  $^7\text{Li}$ ,  $^{56}\text{Fe}$  и  $^{208}\text{Pb}$  различные члены в формуле Вейцзеккера имеют следующие значения:

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{Объемн.} & \text{Поверхн.} & \text{Кулон.} & \text{Энергия} & \text{Изотоп.} \\ \text{член} & \text{член} & \text{член} & \text{симм.} & \text{член} & \text{Сумма} & \text{Ядро} \\ E_B/A = & \begin{cases} 15,75 - 9,31 - 0,48 - 0,48 + 0 = 5,48 \text{ МэВ} & ^7\text{Li} \\ 15,75 - 4,65 - 2,24 - 0,12 + 0,03 = 8,76 \text{ МэВ} & ^{56}\text{Fe} \\ 15,75 - 3,00 - 3,88 - 1,06 + 0,004 = 7,81 \text{ МэВ} & ^{208}\text{Pb} \end{cases} & & & & & & (9) \end{array}$$

Полученные значения удельных энергий связи хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными данными (5,61; 8,79 и 7,88 МэВ). Результаты подтверждают, что с ростом атомного номера  $Z$  роль поверхностного члена уменьшается, а кулоновское взаимодействие вносит все более существенный вклад в энергию связи.

При минимизации полуэмпирического выражения (8) по  $Z$  мы получаем выражение

$$Z = \frac{A/2}{1 + 0,0075A^{2/3}}, \quad (10)$$

которое в области стабильных ядер хорошо описывает экспериментальные данные, приведенные на графике зависимости  $Z$  от  $A - Z$  (рис. 25.3)

## 5. МОДЕЛЬ ОБОЛОЧЕК

Эмпирическая формула Вейцзеккера (8) хорошо описывает экспериментальные значения энергий связи. Однако она не позволяет объяснить результаты ядерной спектроскопии, магнитные моменты

и спины, схемы распада ядер или существование особо стабильных ядер (с числом протонов или нейтронов в ядре, равным одному из так называемых магических чисел 2, 8, 20, 28, 50, 82 и 126). Особо высокой стабильностью отличаются ядра с дважды магическими числами,  ${}^4\text{He}_2$ ,  ${}^{16}\text{O}_8$ ,  ${}^{40}\text{Ca}_{20}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}_{20}$  и  ${}^{208}\text{Pb}_{82}$ . В случае ядер набор магических чисел несколько отличается от аналогичного ряда для атомов (2, 10, 18, 36, 54 и 86), который соответствует атомным номерам инертных газов.

Модель ядерных оболочек строится на основе последовательности энергетических уровней, характеризуемых главным квантовым числом  $n = 1, 2, 3, \dots$ ; орбитальным квантовым числом  $\ell$  и, конечно, спином  $s = 1/2$ . При  $\ell = 0$  полный момент ядра  $j = 1/2$ , а для  $\ell > 0$  каждому из значений  $\ell$  соответствуют два значения  $j$ , равные

$$j = \ell \pm 1/2, \quad (11)$$

поскольку  $m_s = \pm 1/2$ . В модели оболочек используется следующая система обозначения состояний, отвечающих различным значениям квантовых чисел:

Орбитальное								
квантовое								
число $\ell$	0	1	2	3	4	5	6	...
Обозначение	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$	$i$	...
Значения $j$	$\left\{ \begin{array}{c} - \\ 1/2 \end{array} \right.$	$1/2$	$3/2$	$5/2$	$7/2$	$9/2$	$11/2$	...
	$\left\{ \begin{array}{c} 1/2 \\ 3/2 \end{array} \right.$	$5/2$	$7/2$	$9/2$	$11/2$	$13/2$	...	

Таким образом, каждому  $\ell$  соответствует  $2(2\ell+1)$  нуклонов, а каждому  $j$  отвечает  $(2j+1)$  нуклонов.

Спин-орбитальное взаимодействие  $\lambda \ell \cdot \mathbf{s}$  описывается выражением

$$\lambda \ell \cdot \mathbf{s} = \frac{\lambda}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] = \quad (13)$$

$$= \begin{cases} \frac{\lambda}{2} & j = \ell + \frac{1}{2} \\ -\frac{\lambda}{2}(\ell+1) & j = \ell - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (14)$$

в котором константа спин-орбитальной связи  $\lambda$  отрицательна, вследствие чего уровню с большим значением  $j$  соответствует меньшая энергия. Величина расщепления уровней, отвечающих двум значениям  $j$ , составляет  $(\ell+1/2)\lambda$  и увеличивается с ростом  $\ell$ , как показано на рис. 25.4. Однако положение «центра тяжести» расщепленных уровней сохраняется, что можно проверить, умножая величину сдвига каждого уровня на степень его вырождения  $2j+1$ .

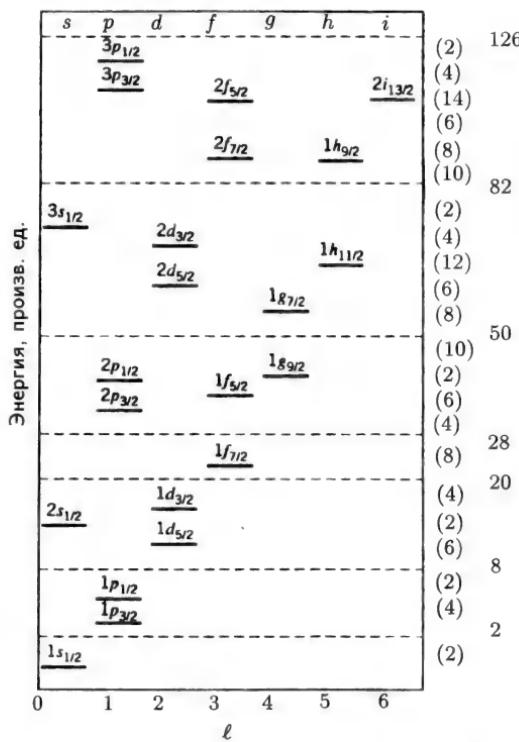


Рис. 25.4. Схема энергетических уровней в модели ядерных оболочек. Числа справа в скобках указывают число нуклонов в подоболочке, а числа в крайней колонке справа (магические числа) показывают число нуклонов в заполненных оболочках. (Из книги: J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^{\circ}$ . Wiley, New York, 1994, p. 305.)

С ростом атомного номера  $Z$  энергетические уровни, начиная с низшего уровня, постепенно заполняются. На рис. 25.4 цифры в круглых скобках справа показывают полное число нуклонов при заполнении данного уровня. Горизонтальные пунктирные линии на рисунке отмечают случаи относительно большого расстояния между последовательными энергетическими уровнями. Подобные зазоры наблюдаются в области ядер с магическими числами нуклонов, обеспечивающими их высокую стабильность (магические числа, отвечающие пунктирным линиям, приведены справа).

Протоны и нейтроны на диаграмме уровней рис. 25.4 имеют одинаковую энергию. Для легких ядер эти энергии действительно

близки друг к другу. Однако в тяжелых ядрах кулоновское взаимодействие оказывается значительным и по мере роста  $Z$  энергия протонов все больше и больше смещается вверх. Этим объясняется поведение зависимости числа протонов  $Z$  от числа нейтронов ( $A - Z$ ) на рис. 25.3. Расхождение между величинами  $Z$  и  $A/2$  (которой соответствует прямая с наклоном, равным единице) становится особенно заметным при очень больших  $Z$  и, например, дважды магический изотоп свинца  $^{208}\text{Pb}_{82}$  содержит 82 протона и 126 нейтронов.

## 6. РАДИОАКТИВНЫЙ РАСПАД

На диаграмме зависимости  $Z$  от  $A - Z$  (рис. 25.3), устойчивые изотопы группируются в окрестности так называемой линии стабильности. Неустойчивые изотопы, удаленные от линии стабильности, испускают альфа-частицы (ядро  $^4\text{He}$ ) или бета-частицы (электроны), приближаясь при этом к линии стабильности. В особенности это относится к элементам с  $Z > 83$ .

Если вещество содержит  $N$  радиоактивных ядер, то они распадаются со скоростью  $-dN/dt$ , пропорциональной числу таких ядер в данный момент  $N(t)$

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad (15)$$

что приводит, после интегрирования, к выражению

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (16)$$

где постоянная  $\lambda$  обратно пропорциональна среднему времени жизни ядра  $\tau$

$$\tau = 1/\lambda. \quad (17)$$

Время, за которое распадается половина ядер  $N(t)$ , называется периодом полураспада  $t_{1/2}$ . Период полураспада связан с величиной  $\tau$  соотношением

$$t_{1/2} = \tau \ln 2. \quad (18)$$

Ситуация осложняется, когда продукт распада (дочернее ядро) оказывается радиоактивным и распадается по собственной схеме с собственным периодом полураспада.

При  $\alpha$ -распаде атомный номер  $Z$  исходного ядра уменьшается на 2, а число нуклонов  $A$  — на четыре, т. е.

$$Z_{\text{дочерн}} = Z_{\text{исх}} - 2, \quad (19)$$

$$A_{\text{дочерн}} = A_{\text{исх}} - 4. \quad (20)$$

При этом выделяется энергия

$$Q = (M_{\text{исх}} - M_{\text{дочерн}} - M_{\alpha})c^2, \quad (21)$$

которая превращается в кинетическую энергию дочернего ядра и  $\alpha$ -частицы

$$Q = \frac{p_{\text{дочерн}}^2}{2M_{\text{дочерн}}} + \frac{p_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}}. \quad (22)$$

Если исходное ядро покоилось, в соответствии с законом сохранения импульса дочернее ядро и  $\alpha$ -частица должны обладать равными и противоположно направленными импульсами,  $\mathbf{p}_{\text{дочерн}} = -\mathbf{p}_{\alpha}$ .

При  $\beta$ -распаде один из нейтронов ядра превращается в протон и электрон (вылетающий из ядра), в результате чего  $Z$  возрастает на единицу, а  $A$  остается неизменным. Распад сопровождается вылетом еще одной частицы  $\bar{\nu}_e$  (электронного антинейтрино), т. е. его схема имеет вид

$$p \Rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e, \quad (23)$$

что обеспечивает сохранение импульса в процессе. Распад (23) может происходить и вне ядра, поскольку  $m_p < m_n$  и свободный нейтрон нестабилен и распадается с периодом полураспада около 17 мин. Обратный процесс, т. е.  $\beta^+$ -распад, имеет вид

$$p \Rightarrow n + e^+ + \nu_e. \quad (24)$$

При этом превращение протона в нейтрон и испускание позитрона  $e^+$  может происходить только внутри ядра, поскольку в этом случае  $m_p < m_n$ , и реакция энергетически невыгодна. Вне ядра протон стабилен и его время жизни, по оценкам, превышает  $10^{32}$  лет. При распаде (24) атомный номер  $Z$  исходного ядра уменьшается на единицу, а  $A$  остается неизменным.

У ядер, претерпевающих  $\beta^+$ -распад, часто происходит захват электрона:

$$p + e^- \Rightarrow n + \nu_e, \quad (25)$$

в результате чего  $Z$  уменьшается на единицу без изменения  $A$ . Обычно захватывается электрон с ближайшей к ядру электронной оболочки, вследствие чего этот процесс получил название К-захвата.

Радиоактивный кобальт  $^{60}\text{Co}$  распадается по схеме

$$^{60}\text{Co} \Rightarrow ^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}_e + \gamma \quad (26)$$

с испусканием  $\gamma$ -кванта, поскольку ядро  $^{60}\text{Ni}$  возникает в возбужденном состоянии и может перейти в основное состояние, лишь

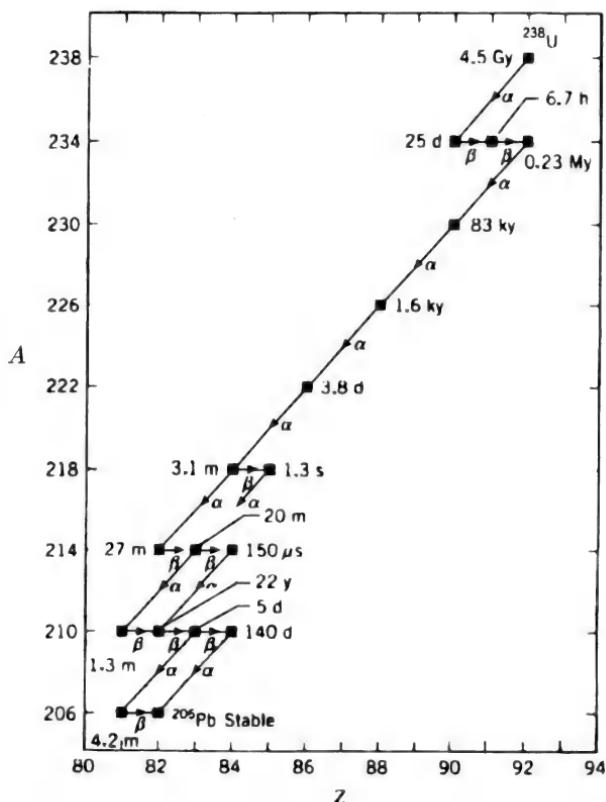


Рис. 25.5. Последовательность радиоактивных распадов, начиная с  $^{238}\text{U}$  до образования дважды магического изотопа  $^{206}\text{Pb}$ . (Из книги: *J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$* , Wiley, New York, 1994, р. 313.)

испуская  $\gamma$ -квант. Под возбужденным состоянием ядра мы подразумеваем, что нуклон находится на энергетическом уровне, энергия которого выше энергии основного состояния. Переход в основное состояние сопровождается испусканием  $\gamma$ -кванта, что характерно для многих радиоактивных превращений.

Существует несколько элементов, которые обладают естественной радиоактивностью, весьма большим временем жизни и испытывают целую последовательность распадов, пока не образуется конечное устойчивое ядро. Например, радиоактивный изотоп  $^{238}\text{U}$ , содержание которого составляет в природном уране 99,3% ( $Z = 92$ ,  $N = 146$  и  $A = 238$ ), имеет период полураспада 4,46 млн. лет. Его

распад до образования устойчивого ядра  $^{206}\text{Pb}$  ( $Z = 82$ ,  $N = 124$  и  $A = 206$ ) сопровождается испусканием восьми  $\alpha$ -частиц, что уменьшает  $A$  на 32 единицы, а  $Z$  — на 16 единиц. Процесс сопровождается также шестью  $\beta^-$ -распадами, повышающими  $Z$  на 6 единиц, поскольку уменьшение  $Z$  в результате  $\alpha$ -распадов оказывается слишком большим. Эти превращения могут происходить несколькими путями, как показано на рис. 25.5. В природе существуют четыре радиоактивных семейства, или ряда, которые начинаются с изотопов  $^{232}\text{Th}$  (относительное содержание в природном тории 100%),  $^{235}\text{U}$  (относительное содержание 0,72%),  $^{237}\text{Np}$  (искусственный элемент) и  $^{238}\text{U}$  и заканчиваются устойчивыми ядрами с магическими числами нуклонов, соответственно,  $^{208}\text{Pb}$ ,  $^{207}\text{Pb}$ ,  $^{209}\text{Bi}$  и  $^{206}\text{Pb}$  с дважды магическим числом нуклонов. Висмут  $^{209}\text{Bi}$  ( $Z = 83$ , относительное содержание 100%) представляет собой стабильный изотоп с самым большим атомным номером, все ядра с большими значениями  $Z$  радиоактивны.

## 7. СПИРАЛЬНОСТЬ И НЕСОХРАНЕНИЕ ЧЕТНОСТИ

Спиральность частицы  $H$  определяется как проекция ее собственного спина  $\hbar\mathbf{S}$  на направление скорости частицы  $\mathbf{v}$ , т. е.

$$H = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{v}}{Sv}. \quad (27)$$

Ниже мы будем называть  $\mathbf{S}$  просто спином частицы. Спиральность может зависеть от выбора системы координат. Например, рассмотрим электрон с положительной спиральностью, т. е. с параллельными векторами  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{v}$ . При преобразовании Лоренца с параллельной скоростью  $v_L > v$  скорость электрона в новой системе координат станет отрицательной, а направление спина не изменится, вследствие чего спиральность электрона также станет отрицательной. С другой стороны, нейтрино движется со скоростью света, так что преобразование Лоренца не может изменить направление его скорости и спиральность останется прежней, всегда отрицательной. Экспериментально установлено, что все нейтрино имеют отрицательную спиральность, следовательно, спиральность является фундаментальной характеристикой нейтрино. В противоположность этому антинейтрино имеют положительную спиральность.

В 1957 г. Ц. С. Ву с сотрудниками экспериментально исследовала  $\beta^-$ -распад ядра  $^{60}\text{Co}$  в  $^{60}\text{Ni}$  (26) в магнитном поле при двух противоположных направлениях поля. Оказалось, что в направле-

нии, противоположном магнитному полю, т. е. противоположном ориентации ядерного спина, испускается большее число электронов. Если бы в распаде сохранялась пространственная четность, то число электронов, испускаемых параллельно и антипараллельно магнитному полю, было бы одинаковым.

Бета-распад обусловлен слабым взаимодействием и вызывается слабыми силами. Из эксперимента был сделан важный вывод, что четность в слабых взаимодействиях не сохраняется. Однако в других взаимодействиях (сильном и электромагнитном) пространственная четность сохраняется, о чём подробнее говорится в следующей главе.

## 8. ЭФФЕКТ МЕССБАУЭРА

Эффект Мессбауэра представляет собой не сопровождающийся отдачей переход ядра из возбужденного состояния в основное. Например, на рис. 25.6 в результате захвата ядром  $^{57}\text{Co}$  электрона, образуется ядро  $^{57}\text{Fe}$  в возбужденном состоянии, которое затем переходит в другое возбужденное состояние, испуская при этом  $\gamma$ -квант с энергией 122 кэВ, а потом — в основное состояние, испуская  $\gamma$ -квант с энергией 14,4 кэВ. Если этот переход происходит в изолированном атоме, то ядро  $^{57}\text{Fe}$  при излучении  $\gamma$ -кванта должно

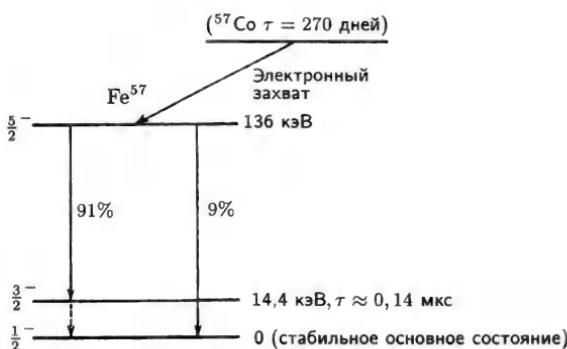
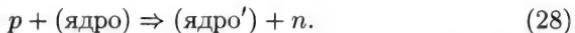


Рис. 25.6. Схема распада ядра  $^{57}\text{Co}$  с образованием ядра  $^{57}\text{Fe}$ . Вертикальные стрелки показывают переходы с излучением  $\gamma$ -кванта. Пунктирная стрелка слева в нижней части рисунка отвечает мессбауэровскому переходу с излучением  $\gamma$ -кванта без отдачи. (Из книги: A. J. Freeman, R. E. Watson. Magnetism, G. T. Rado and H. Suhl (eds), Academic Press, New York, Vol. II A, 1965, p. 167.)

испытывать отдачу ввиду сохранения общего импульса системы. Из-за отдачи энергия испускаемого  $\gamma$ -кванта несколько уменьшается и не удовлетворяет условию  $\Delta E = \hbar\omega$  поглощения этого кванта другим ядром  $^{57}\text{Fe}$ . Однако если излучающее ядро  $^{57}\text{Fe}$  входит в состав кристаллической решетки твердого тела, импульс передается всему кристаллу (т. е. оказывается пренебрежимо малым) и энергия  $\gamma$ -кванта не изменяется. Подобный процесс излучения без потерь энергии на отдачу и составляет сущность эффекта Мессбауэра, который регистрируется по резонансному поглощению излучаемого кванта другим ядром  $^{57}\text{Fe}$ .

## 9. РАДИОУГЛЕРОДНОЕ ДАТИРОВАНИЕ И УГЛЕРОДНЫЙ ЦИКЛ

В завершение этой главы мы рассмотрим некоторые ядерные реакции. Первая из них обеспечивает радиоуглеродное датирование, основанное на образовании радиоактивных ядер  $^{14}\text{C}$  протонным излучением Солнца. Протоны взаимодействуют с ядрами в атмосфере Земли, в результате чего возникают другие ядра и испускаются нейтроны



Нейтроны, взаимодействуя с ядрами азота, превращают их в радиоактивный углерод

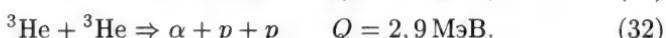
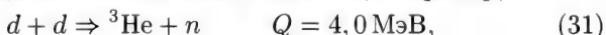


который затем распадается с периодом полураспада 5730 лет, обраzuя изотоп азота  $^{14}\text{N}$

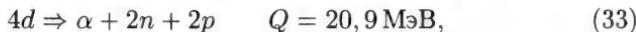


В атмосфере Земли существует динамическое равновесие между концентрациями изотопов  $^{14}\text{C}$  и  $^{12}\text{C}$ , т. е. отношение этих концентраций остается постоянным. Однако если атомы углерода попадают из атмосферы в материалы или соединения (например, входящие в состав древесины или тканей), ядра  $^{14}\text{C}$  в них начинают распадаться согласно (30), и отношение концентрации  $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$  в материалах уменьшается. Измеряя это отношение, можно определить возраст материалов.

Еще одна важная ядерная реакция — это синтез (слияние) ядер. Он может происходить несколькими способами, например,



В итоге реакция превращения  ${}^3\text{He}$  может быть записана в виде



что обеспечивает выделение энергии в количестве 5,2 МэВ на каждый участвующий в реакции дейтрон. Ядро  ${}^3\text{He}$  играет в процессе роль катализатора.

Ядерный синтез служит источником энергии, излучаемой звездами. Чтобы объяснить происхождение этого излучения, был предложен углеродный цикл, который начинается с реакции



а заканчивается реакцией, в которой образуются исходные ядра  ${}^{12}\text{C}$ :



Суммарная реакция включает последовательность шести реакций, образующих так называемый углеродный цикл



где  $p$  и  $\alpha$  заряжены положительно. Углерод играет роль катализатора в реакции слияния четырех протонов с образованием  $\alpha$ -частицы. Углеродный цикл преобладает при температурах, превышающих  $10^8$  К. При более низких температурах преобладает протонный цикл, который начинается с реакции  $p + p$ . Температура в центре Солнца составляет примерно  $1,5 \cdot 10^7$  К, так что его излучение обусловлено протонным циклом, который в итоге сводится к той же реакции (36).

# ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

---

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 21 упоминалось, что размеры атомов лежат в пределах 0,1—0,3 нм, а энергии электронов заключены в диапазоне от нескольких электронвольт (у валентных электронов) до примерно  $10^5$  эВ (у электронов на внутренних оболочках самых тяжелых элементов). В гл. 25 отмечалось, что радиусы атомных ядер составляют 1—8 фм, а полные энергии связи изменяются от 2 МэВ (у самого легкого ядра  $^2\text{H}$ ) до 2 ГэВ (у самых тяжелых ядер). Мы отмечали, что в состав атомов входят электроны, которые взаимодействуют с положительно заряженным ядром атома и друг с другом благодаря кулоновским (электромагнитным) силам. Ядра состоят из нуклонов (нейтронов и протонов), между которыми существует сильное ядерное взаимодействие, а протоны, кроме того, взаимно отталкиваются силами электромагнитного взаимодействия.

Эту главу мы начнем с более подробного описания четырех фундаментальных взаимодействий, введенных в предыдущей главе. Каждое из них осуществляется путем обмена одной или несколькими частицами. Например, электромагнитное взаимодействие связано с обменом фотонами. Помимо частиц, переносящих взаимодействие, существуют два обширных класса элементарных частиц, а именно более тяжелые адроны, участвующие в сильных взаимодействиях, и более легкие лептоны, не участвующие в сильных взаимодействиях. Лептоны являются фермионами, частицами с полуцелыми спинами ( $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ). Адроны, в свою очередь, подразделяются на два класса: более тяжелые барионы (которые также являются фермионами) и более легкие мезоны с целочисленными спинами ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ). Примерами частиц указанных типов могут служить барионы (протон  $p$  и нейтрон  $n$ ) мезоны (пи-

он, или  $\pi$ -мезон, и каон, или  $K$ -мезон) и лептоны (электрон  $e$ , мюон  $\mu$  и  $\tau$ -лептон). Мы начнем с обсуждения природы кварков и антикварков, из которых построены адроны, а затем перейдем к рассмотрению барионов, мезонов и лептонов. Рассмотрение кварков прояснит смысл различных квантовых чисел и других характеристик элементарных частиц, а также правил отбора, определяющих схемы распада и взаимодействия частиц.

## 2. СВОЙСТВА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

В гл. 25 вкратце были описаны четыре типа фундаментальных сил или взаимодействий. Каждая из этих сил характеризуется относительной величиной или интенсивностью  $\alpha_i$ , характерным временем жизни  $\tau_i$ , источником взаимодействия, а также частицей (или частицами), которые служат переносчиками данного типа взаимодействия. Рассмотрим характеристики этих фундаментальных взаимодействий.

Электромагнитные взаимодействия или кулоновские силы описываются законом Кулона

$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (1)$$

который справедлив для любых двух зарядов  $e$ , находящихся на расстоянии  $r$  друг от друга. Интенсивность этого взаимодействия

$$e^2/4\pi\epsilon_0 \quad (2)$$

имеет размерность [энергия  $\times$  расстояние]. Для получения безразмерной характеристики этого взаимодействия рассмотрим упругое рассеяние двух электронов, показанное на диаграмме Фейнмана (рис. 26.1)

$$e + e \Rightarrow e + e, \quad (3)$$

при котором передача импульса происходит путем испускания фотона  $\gamma^* = h\nu$  одним из электронов

$$e \Rightarrow \gamma^* + e \quad (4)$$

и поглощения этого фотона другим электроном

$$\gamma^* + e \Rightarrow e. \quad (5)$$

Частицей, переносящей взаимодействие в этом процессе, является так называемая виртуальная частица, или виртуальный фотон  $\gamma^*$ . Таким образом, взаимодействие двух зарядов и возникающие

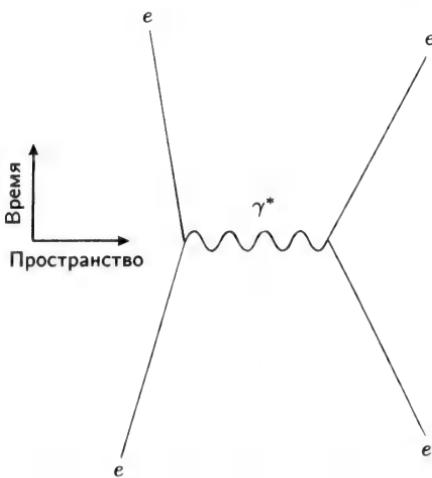


Рис. 26.1. Фейнмановская диаграмма для процесса передачи импульса взаимодействующими электронами через обмен виртуальным фотоном  $\gamma^*$ .

между ними силы связаны с передачей безмассовых частиц, называемых фотонами. Интенсивность такого взаимодействия, обусловленного передачей виртуального фотона, измеряется в единицах [энергия  $\times$  расстояние] и характеризуется произведением энергии фотона  $h\nu$  на его длину волны  $\lambda$ , а это произведение представляет собой универсальную постоянную  $hc$

$$(h\nu)\lambda = hc. \quad (6)$$

Безразмерная величина, характеризующая интенсивность электромагнитного взаимодействия, равна постоянной тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 hc} = \frac{1}{137}, \quad (7)$$

с которой мы уже сталкивались в гл. 21 при определении энергии основного состояния атома водорода. В соответствии с уравнением (16) гл. 21 эта энергия равна  $E_0 = mc^2\alpha^2/2$ .

Гравитационное взаимодействие двух масс, как и кулоновское взаимодействие (1), обратно пропорционально квадрату расстояния

$$F = \frac{Gm_1 m_2}{r^2}. \quad (8)$$

Источником гравитационного взаимодействия является масса, а в качестве частиц, переносящих взаимодействия, выступают гипоте-

тические безмассовые частицы — гравитоны. Безразмерную интенсивность  $\alpha_g$  можно оценить, сравнивая гравитационное и электромагнитное взаимодействия между электроном и протоном:

$$\alpha_g = \alpha \frac{G m_e m_p}{e^2 / 4\pi\epsilon_0} = \frac{G m_e m_p}{\hbar c} \sim 10^{-39}, \quad (9)$$

очевидно, что гравитационное взаимодействие пренебрежимо мало по сравнению с электромагнитным, если взаимодействующими частицами являются электроны и/или протоны.

Протоны и нейтроны при сближении до очень малых расстояний притягиваются друг к другу короткодействующими силами, характерными для сильного взаимодействия. Квантовая теория сильного взаимодействия называется квантовой хромодинамикой (КХД), а частицей, переносящей это взаимодействие между двумя кварками, является безмассовая частица — глюон. По определению, безразмерная величина интенсивности сильного взаимодействия равна единице,  $\alpha_s = 1$ .

Слабое взаимодействие вызывает превращение протонов и нейтронов друг в друга в процессах  $n \Rightarrow p + e$  и  $e + p \Rightarrow n$ . Слабое взаимодействие существует между лептонами и кварками, а его переносчиком служат тяжелые частицы  $W^+$ ,  $W^-$  и  $Z^0$  называемые промежуточными векторными бозонами.

Каждое из перечисленных взаимодействий характеризуется собственной временной константой, которая обратно пропорциональна квадрату его интенсивности. Временные константы отражают ха-

**Таблица 26.1.** Характеристики четырех фундаментальных взаимодействий.

Вид взаимодействия	Источник взаимодействия	Промежуточная частица	Относительная интенсивность	Характерное время $\tau_i$ , с
Сильное	Цветовой (сильный) заряд	Глюон	1	$10^{-23}$
Электромагнитное	Электрический заряд	Фотон	$1/137$	$10^{-19}$
Слабое	Слабый заряд	Векторные бозоны $W$ и $Z_0$	$10^{-6}$	$10^{-11}$
Гравитационное	Масса	Гравитон	$10^{-39}$	—

рактерные времена распада соответствующих частиц. Например, константа времени сильного взаимодействия  $\tau_s$  представляет собой время, за которое свет проходит расстояние, равное поперечнику протона, т. е.

$$\tau_s = (10^{-15} \text{ м}) / (3 \times 10^8 \text{ м/с}) = 10^{-23} \text{ с.} \quad (10)$$

Для электромагнитного и слабого взаимодействий эти константы соответственно равны

$$\tau_{em} = \tau_s / \alpha^2 \sim 10^{-19} \text{ с,} \quad (11)$$

$$\tau_w = \tau_s / \alpha_w^2 \sim 10^{-11} \text{ с.} \quad (12)$$

Общие характеристики и свойства перечисленных фундаментальных взаимодействий систематизированы в табл. 26.1.

### 3. СВОЙСТВА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Тремя основными характеристиками (элементарной) частицы служат ее масса  $m$ , спин  $s$  и заряд  $q/e$  (где  $e$  — величина электрического заряда электрона и протона). Если две, три или большее число частиц одного типа (барионов, мезонов или лептонов) имеют одинаковый спин и примерно равные массы, то их можно рассматривать в качестве различных состояний одной частицы. Для характеристики такой группы частиц используется величина, называемая изоспином  $I$ , причем  $(2I + 1)$  равняется числу частиц в группе. Каждой частице приписывается величина проекции изотопического спина  $m_I$  ( $-I \leq m_I \leq I$ ), аналогичная проекции момента импульса. Например, протон и нейтрон рассматриваются как два состояния бариона, называемого нуклоном, с изоспином  $1/2$ , проекция которого  $m_I = +1/2$  отвечает протону, а  $m_I = -1/2$  нейтрону. Пи-мезону, или пиону, приписывается изоспин  $I = 1$ , три проекции которого ( $m_I = +1, 0$  и  $-1$ ) соответствуют трем зарядовым состояниям этой частицы, т. е.  $\pi^+$ ,  $\pi^0$  и  $\pi^-$ .

Каждой элементарной частице приписывается также барионный «заряд», или квантовое число  $B$ , которое для различных частиц имеет следующие значения:

$$\begin{aligned} B = +1 & \quad \text{для бариона,} \\ B = -1 & \quad \text{для антибариона,} \\ B = +\frac{1}{3} & \quad \text{для кварка,} \\ B = -\frac{1}{3} & \quad \text{для антикварка,} \\ B = 0 & \quad \text{для остальных частиц.} \end{aligned} \quad (13)$$

Заряд элементарной частицы  $q/e$  определяется обобщенной формулой Гелл-Мана—Нишиджимы

$$q/e = m_I + \frac{1}{2}(B + S + C), \quad (14)$$

где  $S$  и  $C$  — дополнительные квантовые числа, странность и очарование, которые мы определим ниже. Формула соответствует проекциям изотопического спина  $m_I$  для нуклонов и пионов, поскольку эти частицы обладают нулевой странностью  $S = 0$ . Это значение  $S$  было приписано им, потому что нуклоны и пионы составляли значительную часть обычных частиц, так что остальные частицы были названы «странными», т. е. для них  $S \neq 0$ . Странность является аддитивным квантовым числом, т. е. в системе нескольких частиц

$$S = \sum S_i. \quad (15)$$

Существует закон сохранения странности, в соответствии с которым в сильных и электромагнитных взаимодействиях суммарная странность системы (15) до и после реакции должна быть одинаковой. Этот закон, однако, не обязательно имеет место в случае слабых взаимодействий. Примером слабого взаимодействия служит бета-распад, при котором нейтрон внутри ядра превращается в протон, а ядро испускает положительно заряженный электрон и нейтрино:

$$p \Rightarrow n + e^+ + \nu_e. \quad (16)$$

Мы уже знакомы с позитроном  $e^+$  как античастицей электрона  $e^-$ . Оба имеют одинаковую массу, но противоположные по знаку заряды. У каждой пары античастиц совпадают массы, но противоположны знаки четырех других величин в (14), т. е.  $q$ ,  $m_I$ ,  $B$  и  $S$ . Например, заряженные пионы  $\pi^+$  и  $\pi^-$  имеют массу  $m = 139,6 m_e$  и являются античастицами по отношению друг к другу. Нейтральный пion  $\pi^0$  обладает чуть меньшей массой ( $135,0 m_e$ ) и является собственной античастицей. Дальнейшие примеры античастиц будут приведены ниже.

#### 4. ТРЕХКВАРКОВАЯ МОДЕЛЬ

Для описания многочисленных свойств адронов плодотворной оказалась модель, согласно которой как более тяжелые фермионы — барионы, так и более легкие бозоны — мезоны могут быть построены из трех夸克ов. Эти кварки получили названия «верхний», «нижний» и «странный», или  $u$ ,  $d$  и  $s$ , а их основные характеристики приводятся в табл. 26.2. Барион состоит из трех кварков, а

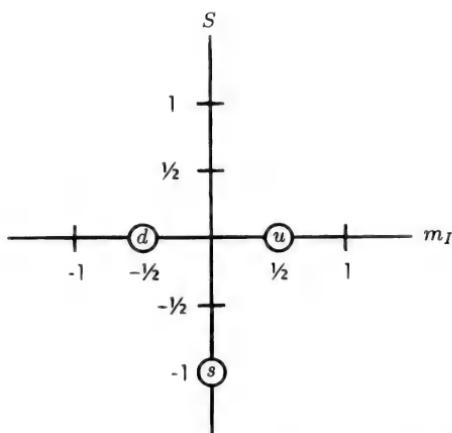


Рис. 26.2. Диаграмма  $S - m_I$  для  $u$ -,  $d$ - и  $s$ -кварков.

поскольку его барионное число  $B$  равно единице, каждому из кварков следует приписать  $B = \frac{1}{3}$ . Мезоны построены из пары кварк — антикварк (у каждого кварка, естественно, имеется своя античастица), а поскольку барионное число мезона  $B = 0$ , антикварку следует приписать  $B = -\frac{1}{3}$ .

Из таблицы видно, что странность  $u$ - и  $d$ -кварков есть  $S = 0$ , их энергия покоя  $mc^2$  крайне мала и они образуют изоспиновый дублет с  $I = \frac{1}{2}$ , причем  $m_I = +\frac{1}{2}$  для  $u$ -кварка и  $m_I = -\frac{1}{2}$  для  $d$ -кварка. Третий кварк в этой модели ( $s$ -кварк) обладает странностью  $S = -1$ , значительно большей энергией покоя и представляет собой изоспиновый синглет  $I = 0$  с  $m_I = 0$  (рис. 26.2). Используя формулу Гелл-Мана — Нишиджимы (14), легко определить, что  $u$ -,  $d$ - и  $s$ -кварк имеют заряды  $q/e = +\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}$  и  $-\frac{1}{3}$ , соответственно. В таблице приведены характеристики соответствующих антикварков  $\bar{u}$ ,  $\bar{d}$  и  $\bar{s}$ , а также характеристики четвертого «очарованного», или  $c$ -кварка, который будет введен позднее в этой главе.

Для классификации адронов по мультиплетам используется теория групп, в частности, унитарная группа симметрии  $SU(3)$  размерностью 3. Для случая трех кварков ( $u$ ,  $d$ ,  $s$ ) и трех антикварков ( $\bar{u}$ ,  $\bar{d}$ ,  $\bar{s}$ ) существует  $3^2 = 9$  возможных комбинаций, отвечающих мезонам, характеристики которых приведены в табл. 26.3. Математический формализм  $SU(3)$ -симметрии включает операции прямого произведения  $\otimes$  и прямой суммы  $\oplus$  при разложении нонета из

Таблица 26.2. Характеристики первых четырех кварков и антикварков. Все имеют спин  $s = \frac{1}{2}$ .

Характеристика	Кварки				Антикварки			
	$u$	$d$	$s$	$c$	$\bar{u}$	$\bar{d}$	$\bar{s}$	$\bar{c}$
Изоспин $I$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
Проекция изоспина $m_I$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	0	0
Заряд $q/e$	$+\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$+\frac{2}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$
Барионное число $B$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
Странность $S$	0	0	-1	0	0	0	+1	0
Очарование $C$	0	0	0	+1	0	0	0	-1
Четность $P$	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
Энергия покоя $mc^2$ , МэВ	$5 \pm 3$	$10 \pm 5$	$200 \pm 100$	$1500 \pm 200$	$5 \pm 3$	$10 \pm 5$	$200 \pm 100$	$1500 \pm 200$

**Таблица 26.3.** Характеристики нонета псевдоскалярных мезонов. Все частицы имеют спин  $j = 0$ , четность  $P = -1$ , барионное число  $B = 0$  и «очарование»  $C = 0$ . Всем частицам соответствует состояние  $j^P = 0^-$ .

Характеристика	Частица							
	$\pi^+_{u\bar{d}}$	$\pi^0_{(u\bar{u}, d\bar{d})}$	$\pi^-_{d\bar{u}}$	$K^0_{d\bar{s}}$	$K^+_{u\bar{s}}$	$K^-_{s\bar{u}}$	$\bar{K}^0_{s\bar{d}}$	$\eta, \eta'_{(u\bar{u}, d\bar{d}, s\bar{s})}$
Изоспин $I$	1	1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
Проекция изоспина								
$m_I$	+1	0	-1	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	0
Заряд $q/e$	+1	0	-1	0	+1	-1	-1	0
Странность $S$	0	0	0	+1	+1	-1	-1	0
Масса, ГэВ/с <sup>2</sup>	139,57	134,97	139,57	497,7	493,7	493,7	497,7	547,958
Время жизни $\tau$ , с	$2,6 \times 10^{-8}$	$8,4 \times 10^{-17}$	$2,6 \times 10^{-8}$	—	$1,2 \times 10^{-8}$	$1,2 \times 10^{-8}$	—	$10^{-19}, 10^{-21}$

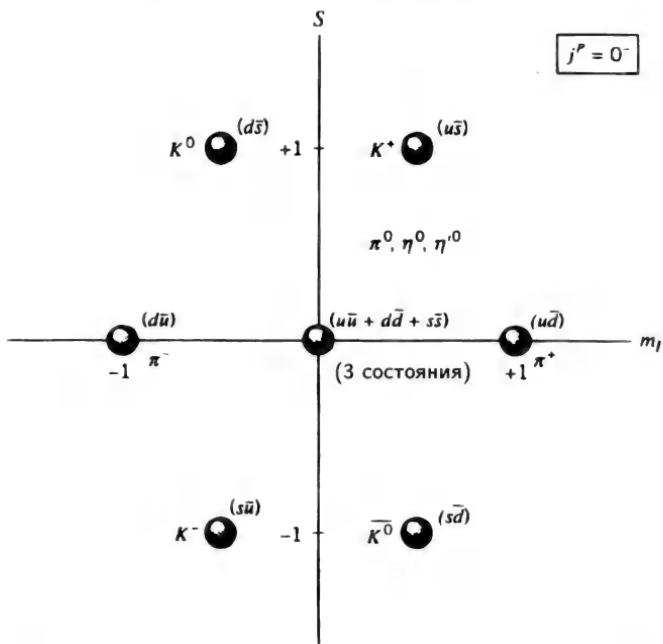


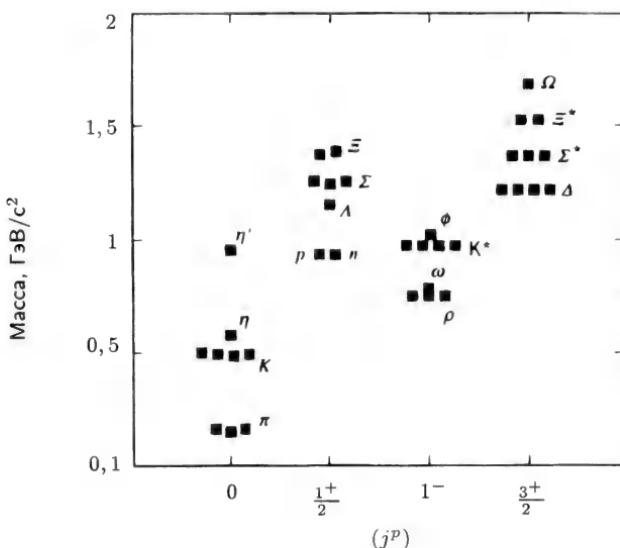
Рис. 26.3. Диаграмма  $S - m_I$  для nonета псевдоскалярных мезонов  $j^P = 0^-$ . (Из книги: J. W. Rohlff, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$ , Wiley, New York, 1994, p. 484.)

девяти мезонов на синглет и октет

$$3 \otimes 3 = 1 \oplus 8. \quad (17)$$

Диаграмма  $S - m_I$  nonета представлена на рис. 26.3. Каждая частица на диаграмме изображена комбинацией кварк — антикварк. В начале координат возможны три комбинации  $(u\bar{u}, d\bar{d}$  и  $s\bar{s})$ , отвечающие двум частицам октета ( $\pi^0$  и  $\eta$ ) и частице-синглету  $\eta'$ . Все они представляют собой линейные комбинации трех сочетаний  $q\bar{q}$ , отвечающих началу координат. Частицы, расположенные по противоположным сторонам диаграммы nonета, т. е. пара  $\pi^+, \pi^-$ , а также пара  $K^+, K^-$  являются античастицами по отношению друг к другу.

Массы этих девяти мезонов (в единицах  $\text{ГэВ}/c^2$ ) отложены в левой нижней части рис. 26.4. Отметим, что масса синглета  $\eta'$  несколько превышает массу остальных восьми членов октета. У всех частиц октета спины кварка и антикварка антипараллельны, вслед-



**Рис. 26.4.** Распределение адронов по массам. Слева направо: нонет псевдоскалярных мезонов ( $0^-$ ); октет барионов в основном состоянии ( $\frac{1}{2}^+$ ); октет векторных мезонов ( $-1$ ) и декуплет барионов ( $(\frac{3}{2})^+$ ). (Из книги: *J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$* , Wiley, New York, 1994, p. 482.)

ствие чего спин  $s$  у всех мезонов равен нулю. Кроме того, у кварков отсутствует орбитальный момент ( $\ell = 0$ ) и, следовательно, полный момент также равен нулю,  $j = \ell + s = 0$ . Четность мезона

$$P = P_q \cdot P_{\bar{q}} (-1)^\ell = (-1)^{\ell+1}, \quad (18)$$

где собственные четности кварка и антiquarka равны  $P_q = +1$  и  $P_{\bar{q}} = -1$ , соответственно. В рассматриваемом случае  $\ell = 0$  и результирующая четность мезона равна  $-1$ . Поскольку  $j = 0$ , каждый мезон может считаться скалярной частицей. Скаляр, обладающий четностью  $-1$ , называется псевдоскаляром, и все описанные мезоны называют псевдоскалярными. Псевдоскалярный характер обозначают для краткости  $j^P = 0^-$ , как на рис. 26.3 диаграммы нонета псевдоскалярных мезонов.

Существует еще один нонет мезонов с большей массой типа изображенного на рис. 26.3, соответствующий возбужденным состояниям мезонов. Такие мезоны образованы парами кварк — антикварк с параллельными спинами, так что они имеют спин  $s = 1$ . Поскольку и в этом случае  $\ell = 0$ , то  $j = \ell + s = 1$ . Такие мезоны

называются векторными и обозначаются  $j^P = 1^-$ . Были обнаружены нонеты других возбужденных состояний мезонов, некоторые с  $\ell > 1$ .

Барионы образованы тремя кварками и полное число их составляет  $3^3 = 27$ .  $SU(3)$ -симметрия позволяет разделить их на синглет, два октета и один декуплет:

$$3 \otimes 3 \otimes 3 = 1 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 10. \quad (19)$$

На рис. 26.4 – 26.6 представлены, соответственно, распределение барионов по массе, а также диаграммы  $S - m_I$  для октета и декуплета основных состояний. Октет основных состояний включает восемь барионов, характеристики которых приведены в табл. 26.4 и на рис. 26.5. Это наиболее важный мультиплет, поскольку в его состав входят протон  $p$  и нейтрон  $n$ , т. е. «обычные» частицы с нулевой странностью. У частиц, входящих в этот октет, суммарный

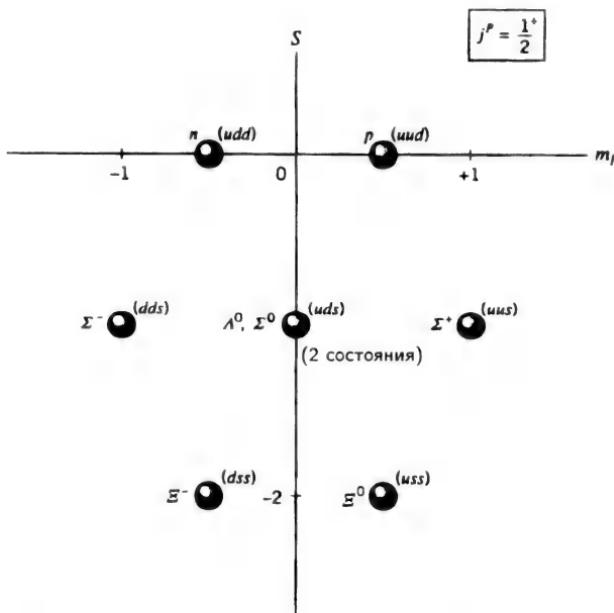


Рис. 26.5. Диаграмма  $S - m_I$  для октета барионов в основном состоянии  $j^P = \frac{1}{2}^+$ . (Из книги: J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$ , Wiley, New York, 1994, р. 487.)

**Таблица 26.4.** Характеристики октета барионов в основном состоянии. Частицы имеют спин  $j = \frac{1}{2}$ , четность  $P = +1$ , барионное число  $B = +1$  и «очарование»  $C = 0$ . Всем частицам соответствует состояние  $j^P = (\frac{1}{2})^+$ .

Характеристика	Частица							
	$p$ $uud$	$n$ $udd$	$\Sigma^+$ $uus$	$\Sigma^0$ $uds$	$\Sigma^-$ $dds$	$\Xi^0$ $uss$	$\Xi^-$ $dss$	$\Lambda^0$ $uds$
Изоспин $I$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
Проекция изоспина $m_I$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	+1	0	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
Заряд $q/e$	+1	0	+1	0	-1	0	-1	0
Странность $S$	0	0	-1	-1	-1	-2	-2	-1
Энергия покоя $mc^2$ , ГэВ	938,27	939,57	1189,4	1192,6	1197,4	1315	1321,3	1115,6
Время жизни $\tau$ , с	$\infty$	$0,89 \times 10^3$	$8,0 \times 10^{-11}$	$7,4 \times 10^{-20}$	$1,5 \times 10^{-10}$	$2,9 \times 10^{-10}$	$1,6 \times 10^{-10}$	$2,6 \times 10^{-10}$

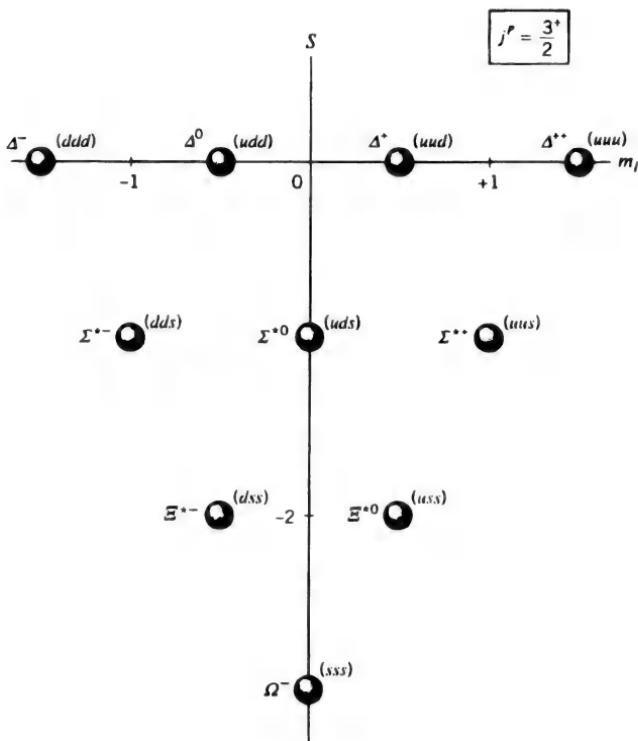


Рис. 26.6. Диаграмма  $S - m_I$  для декуплета барионов  $j^P = \left(\frac{3}{2}\right)^+$ . (Из книги: J. W. Rohlf, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$ , Wiley, New York, 1994, p. 485.)

спин равен  $s = \frac{1}{2}$ . Орбитальные моменты  $\ell = 0$ , вследствие чего полный момент  $j = \frac{1}{2}$ . Поэтому для барионов, содержащих три кварка, формула (18) для четности приобретает вид

$$P = P_q P_{q'} P_{q''} (-1)^\ell = (-1)^\ell, \quad (20)$$

где  $P = +1$  для каждого кварка. Поскольку для октета основных состояний  $\ell = 0$ , полная четность равна  $+1$ , что обозначается как  $j^P = \left(\frac{1}{2}\right)^+$ . Частицы, входящие в декуплет рис. 26.6, содержат три кварка с параллельными спинами и  $\ell = 0$ , так что  $s = \frac{3}{2}$ , вследствие чего  $j = \left(\frac{3}{2}\right)$  и  $j^P = \left(\frac{3}{2}\right)^+$ . Массы барионных мультиплетов  $\left(\frac{1}{2}\right)^+$  и  $\left(\frac{3}{2}\right)^+$  приведены на рис. 26.4.

## 5. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ В ПРОЦЕССАХ С УЧАСТИЕМ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Процессы с участием элементарных частиц, включая их распады, подчиняются законам сохранения. Прежде всего это хорошо известные законы сохранения, о которых говорилось выше, такие, как закон сохранения импульса и момента импульса, энергии, заряда и т. п. Однако имеются дополнительные законы сохранения, относящиеся к некоторым новым квантовым числам, введенным в данной главе. Например, во всех взаимодействиях должно сохраняться суммарное барионное квантовое число, т. е.

$$B = \Sigma B_i = \text{const}, \quad (21)$$

где  $B$  — сумма барионных чисел всех исходных частиц, которая должна равняться сумме барионных чисел после превращения. В противоположность этому закон сохранения странности

$$S = \Sigma S_i = \text{const} \quad (22)$$

выполняется лишь для сильных и электромагнитных взаимодействий, но не для слабых взаимодействий.

В разд. 2 этой главы уже отмечалось, что временные константы  $\tau$ , отвечающие сильным электромагнитным и слабым взаимодействиям, составляют  $10^{-23}$ ,  $10^{-19}$  и  $10^{-11}$  с, соответственно. Если в процессе участвуют все типы взаимодействий, то результирующая скорость превращения будет определяться суммой скоростей всех процессов, в которой, очевидно, доминирует сильное взаимодействие, а два других члена пренебрежимо малы. Если превращение за счет сильного взаимодействия запрещено, то скорость процесса будет определяться электромагнитным механизмом, и лишь в случае, когда превращение, обусловленное двумя указанными типами взаимодействий, запрещено, процесс будет определяться слабым взаимодействием. Например, барион  $\Delta^{++}$  распадается за счет сильного взаимодействия

$$\Delta^{++} \Rightarrow p + \pi^+, \quad (23)$$

которому соответствует  $\Delta S = 0$ , так как странности всех частиц равны нулю. В противоположность этому  $\Omega^-$ -барион из декуплета с  $S = -3$  не может распадаться за счет сильного взаимодействия, поскольку не существует комбинации адронов с массами меньше массы  $\Omega^-$ , которая обеспечила бы сохранение  $S = -3$ ,  $q = -e$  и  $B = +1$ . Поэтому распад этой частицы происходит за счет цепочки

из трех слабых взаимодействий (под каждым распадом приведено изменение странности)

$$\begin{aligned}\Omega^- &\Rightarrow \Xi^0 + \pi^-, \\ (-3) &\Rightarrow (-2) + (0),\end{aligned}\tag{24a}$$

$$\begin{aligned}\Xi^0 &\Rightarrow \Lambda^0 + \pi^0, \\ (-2) &\Rightarrow (-1) + (0),\end{aligned}\tag{24b}$$

$$\begin{aligned}\Lambda^0 &\Rightarrow p + \pi^-, \\ (-1) &\Rightarrow (0) + (0).\end{aligned}\tag{24c}$$

которые могут быть объединены результирующим уравнением распада

$$\begin{aligned}\Omega^- &\Rightarrow p + 2\pi^- + \pi^0, \\ (-3) &\Rightarrow (0) + (0) + (0),\end{aligned}\tag{25}$$

где протон — стабильная частица. Заряженные пионы распадаются в лептоны за счет слабого взаимодействия со средним временем жизни  $\tau = 2,6 \cdot 10^{-8}$  с, а нейтральный пион распадается за счет электромагнитного взаимодействия спустя  $8,7 \cdot 10^{-17}$  с

$$\begin{aligned}\pi^+ &= \mu^+ + \nu_\mu, \\ \pi^0 &= \gamma + \gamma, \\ \pi^- &= \mu^- + \bar{\nu}_\mu.\end{aligned}\tag{26}$$

Таким образом, время жизни частицы характеризует тип взаимодействия, ответственного за ее превращение.

Взаимодействия, происходящие при столкновении двух частиц, используются для получения новых видов элементарных частиц. Например, процесс сильного взаимодействия ( $\Delta S = 0$ )

$$\begin{aligned}K^- + p &\Rightarrow \Omega^- + K^+ + K^0 \\ (-1) + (0) &\Rightarrow (-3) + (+1) + (+1)\end{aligned}\tag{27}$$

используется для рождения  $\Omega^-$ -бариона, который упоминался выше.

## 6. ЛЕПТОНЫ

Лептоны представляют собой относительно легкие частицы. Наиболее известными примерами лептонов служат электрон  $e^-$  и его античастица позитрон  $e^+$ , а также мюоны  $\mu^-$  и  $\mu^+$ , которые по-добны отрицательно и положительно заряженным электронам, но

имеют большую массу  $m = 206,8 m_e$  и нестабильны. Время жизни мюонов 2,2 мкс. Они распадаются за счет слабых взаимодействий

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_\mu + \nu_e, \quad (28a)$$

$$\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e. \quad (28b)$$

Существует также тяжелый лептон, называемый тау-частицей,  $\tau$ , с массой  $m = 3477 m_e$ . Кроме этого, к лептонам относятся безмассовые нейтрино (электронное, мюонное и  $\tau$ -лептонное) и их античастицы, обозначаемые, соответственно,  $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$  и  $\bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_\tau$ . Частица  $\tau^-$  распадается по схеме, сходной с (28б), и с очень коротким временем жизни  $2,9 \cdot 10^{-13}$  с.

## 7. ЦВЕТ, ОЧАРОВАНИЕ, КРАСОТА И ИСТИНА

В разд. 4 обсуждалась трехкварковая модель, согласно которой барионы представляют собой комбинации трех夸ков, а мезоны — комбинации夸ка и анти夸ка. Такая модель объясняет свойства большинства известных адронов. В квантовой хромодинамике (КХД)夸кам приписывается сильный, или «цветовой», заряд (его иногда называют просто «цветом»), который имеет три разновидности,  $R, G$  и  $B$  (т. е. соответствует красному, зеленому и синему цветам). Каждый из夸ков ( $u, d$  и  $s$ ) может иметь любой из этих цветов.夸ки, образующие барион, должны иметь разные цвета, так что результирующий цветовой заряд бариона равен нулю и барион оказывается цветовым синглетом. Это же справедливо и для антибарионов, состоящих из трех анти夸ков, каждый со своим антицветом, что приводит в результате к цветовому синглету. Мезоны, составленные из夸ка и анти夸ка, представляют собой систему с нулевым цветовым зарядом.

В дополнение к трем основным夸кам  $u, d$  и  $s$  позднее были предсказаны и открыты еще три значительно более тяжелых夸ка (характеристики夸ков приведены в табл. 26.2). Первый из этих夸ков назван «очарованным» и имеет энергию покоя 1,5 ГэВ. Этому夸ку приписано особое квантовое число («очарование»), обозначаемое через  $C$  и равное +1. У трех легких夸ков ( $u, d$  и  $s$ ) это число равно нулю,  $C = 0$ . Связанное состояние очарованного夸ка с собственной античастицей названо «чармонием» и наблюдалось экспериментально.

Выше мы уже отмечали, что для классификации элементарных частиц была использована простая унитарная группа симметрии  $SU(n)$ . Группа  $SU(2)$  используется для классификации частиц

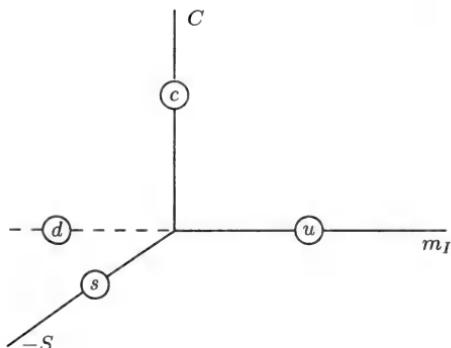


Рис. 26.7. Расположение четырех夸克ов ( $u, d, s$  и  $c$ ) в трехмерном пространстве  $m_I, S, C$ .

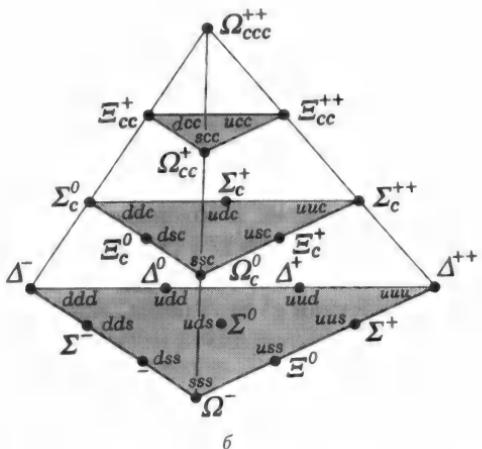
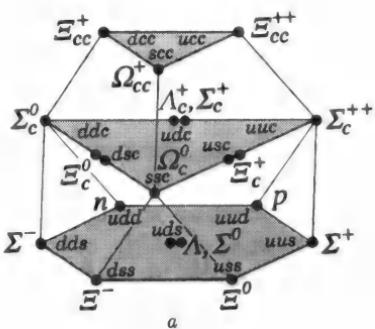
изотопического мультиплета, включающего  $(2I + 1)$  состояний  $m_I$ . Группа симметрии более высокого порядка  $SU(3)$  позволяет учесть странность и классифицировать частицы по еще одному измерению  $S$ . Можно построить плоские диаграммы в осях  $S - m_I$  (см. рис. 26.2, 26.3, 26.5 и 26.6), которые описывают синглеты ( $\eta'$ ), тринкеты (кварки), октеты (барионы и мезоны) и декуплеты (барионы) частиц. Следующая группа более высокой симметрии  $SU(4)$  позволяет учесть «очарование» и спроектировать мультиплеты  $SU(3)$  из плоскости  $S - m_I$  с учетом третьего измерения  $C$ , как это показано на рис. 26.7 для четырех夸克ов ( $u, d, s$  и  $c$ ), изображенных в пространстве  $S, m_I, C$ .

Как уже отмечалось, барионы состоят из трех夸克ов, поэтому с введением четвертого夸кка число возможных комбинаций увеличивается в четыре раза. В отсутствие «очарования» мы имели обычные комбинации夸克ов, например для протона ( $uud$ ). Учет четвертого夸кка приводит к очарованным барионам типа  $\Sigma_c^+ (udc)$ ,  $\Xi_{cc}^{++} (ucc)$  и  $\Omega_{ccc}^{++} (ccc)$ .

Полное число комбинаций из трех夸克ов ( $qq'q''$ ) с учетом «очарованного»夸кка составляет  $4^3 = 64$ . Разложение группы  $SU(4)$  дает один 4-плет и три 20-плета

$$4 \otimes 4 \otimes 4 = 4 \oplus 20 \oplus 20 \oplus 20. \quad (29)$$

Первому мультиплету соответствует конфигурация тетраэдра, содержащая барионы без «очарования» и с «очарованием», равным единице. Два 20-плета имеют форму фигуры с 11 гранями; они включают барионы с «очарованием»  $C = 0, 1, 2$ . И наконец, пи-



**Рис. 26.8.** Диаграммы 20-плетов барионов в соответствии с классификацией  $SU(4)$ . В основании диаграммы *а* — октет основных состояний с  $c = 0$  рис. 26.5; в основании диаграммы *б* — декуплет состояний с  $c = 0$ , рис. 26.6 (см. журнал *Phys. Rev. D* 54, Part 1, 1996, р. 100, спец. номер; а также справочник *Particle Properties Data Book*, AIP Press, New York, 1996).

рамидалльный 20-плет включает барионы с «очарованием»  $C = 0, 1, 2$  и один барион  $(\Omega_{ccc}^{++})$  с тройным «очарованием». Тетраэдальный квартет включает комбинации  $(uds)$  без «очарованного» кварка и три комбинации  $(udc, usc$  и  $dsc)$  с одним «очарованным»夸рком, причем они не содержат двух одинаковых夸рков. На рис. 26.8 представлены диаграммы двух пирамидальных 20-плетов. В основании первой диаграммы (рис. 26.8, a) лежит октет барионов

онов, не содержащих «очарованный» кварк. Пирамида в нижней части рис. 26.8,б имеет в основании декуплет, также знакомый по рис. 26.6. Некоторые из «очарованных» частиц в этих супермультиплетах наблюдались на опыте.

Для полноты рассмотрим также разложение, связанное с  $SU(2)$ . В этой группе симметрии отсутствует странность ( $S = 0$ ) и присутствуют только два типа夸克ов  $u$  и  $d$ . Поэтому возможны барионы, содержащие по одному сочетанию ( $uuu$ ) и ( $ddd$ ), а также по три сочетания ( $uud$ ) и ( $udd$ ), что дает восемь комбинаций. С другой стороны, число комбинаций равно  $2^3 = 8$ . Разложение  $SU(2)$  дает два дублета и один квартет

$$2 \otimes 2 \otimes 2 = 2 \oplus 2 \oplus 4, \quad (30)$$

вследствие чего разрешены лишь мультиплеты с  $S = 0$ , для которых  $2I + 1 = 2$  и 4, что означает  $I = \frac{1}{2}$  и  $\frac{3}{2}$ . Другими словами, для барионов с  $S = 0$  из всех изоспиновых мультиплетов разрешены только дублет и квартет. Легко проверить, что именно так обстоит дело, эти мультиплеты присутствуют на рис. 26.2, 26.3, 26.5 и 26.8.

Помимо «очарованного» кварка был введен, а позднее и обнаружен еще один тяжелый кварк  $b$  с энергией покоя  $\sim 5$  ГэВ и зарядом  $(-e/3)$ , названный «красивым» или нижним. Предполагается, что этот кварк входит в дублет; вторая частица из этой пары (верхний, или  $t$ -кварк, который называют также «истинным») имеет энергию покоя примерно 170 ГэВ.

## ГЛАВА 27

---

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. ТЕНЗОРЫ И МАТРИЦЫ

---

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В двух заключительных главах мы изложим основы математического аппарата современной физики и приведем наиболее часто используемые математические формулы и уравнения. В данной главе речь идет о векторном анализе, определителях, матрицах, тензорах, конечных и бесконечных рядах, преобразованиях Фурье и интегральных преобразованиях, функциях комплексного переменного, теории групп и методе Монте-Карло. Для удобства читателя приведены наиболее часто встречающиеся функции, а также некоторые формулы, которые нелегко разыскать в стандартных математических справочниках. В следующей, заключительной главе изложен дополнительный материал, относящийся к решениям дифференциальных уравнений и некоторым специальным вопросам, таким как гамма-функция, дельта-функция и функции Грина.

### 2. ВЕКТОРНЫЙ АНАЛИЗ

Вектор характеризуется величиной и направлением. В этом разделе мы будем обозначать векторы прямыми заглавными буквами и выделять их жирным шрифтом. Скаляры, характеризуемые только величиной, будут обозначаться строчными буквами. Ниже приведены некоторые соотношения между векторами, а также между связанными с ними тензорами (Т):

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \quad \mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = -\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{B}) = -(\mathbf{B} \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{C} = \\ &= \text{объем параллелепипеда} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}), \quad (3)$$

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{A} \cdot [\mathbf{B} \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}), \quad (4)$$

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{A} [\mathbf{C} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{D}] + \mathbf{B} [\mathbf{D} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{C})]. \quad (5)$$

Кроме этого используются операции градиента  $\nabla$ , дивергенции  $\nabla \cdot$  и ротора вектора  $\nabla \times$ , причем

$$\text{если } \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \text{ то } \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \text{ и } \mathbf{B} \text{— соленоидальный вектор,} \quad (6)$$

$$\text{если } \nabla \times \mathbf{B} = 0, \text{ то } \mathbf{B} = -\nabla f \text{ и } \mathbf{B} \text{— безвихревой вектор,} \quad (7)$$

$$\nabla(ab) = a\nabla b + b\nabla a, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (a\mathbf{A}) = a\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla a, \quad (9)$$

$$\nabla \times (a\mathbf{A}) = a\nabla \times \mathbf{A} + (\nabla a) \times \mathbf{A}, \quad (10)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\nabla \times \mathbf{A}) \mathbf{B} - (\nabla \times \mathbf{B}) \mathbf{A}, \quad (11)$$

$$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{A} (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B} (\nabla \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A}, \quad (12)$$

$$\mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) = (\nabla \mathbf{B}) \cdot \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B}, \quad (13)$$

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A}, \quad (14)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\mathbf{B}) = (\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{B} + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B}, \quad (15)$$

$$\nabla(a\mathbf{T}) = a\nabla \mathbf{T} + (\nabla a)\mathbf{T}, \text{ где } \mathbf{T} \text{ — тензор.} \quad (16)$$

Последовательное дифференцирование скалярных функций  $f$  и векторов  $\mathbf{A}$ , например, применение оператора Лапласа  $\nabla^2$  (лапласиана) к скалярной или векторной функции дает

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f, \quad (17)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}), \quad (18)$$

$$\nabla \times \nabla f = 0, \quad (19)$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0. \quad (20)$$

Дифференцирование радиуса-вектора  $\mathbf{r}$  дает

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 3 \quad \nabla \times \mathbf{r} = 0, \quad (21)$$

$$\nabla r = \mathbf{r}/r = \hat{\mathbf{r}} \quad \nabla(1/r) = -\mathbf{r}/r^3, \quad (22)$$

$$\nabla^2(1/r) = -\nabla \cdot (\mathbf{r}/r^3) = 4\pi\delta(r). \quad (23)$$

Особое значение имеют приводимые ниже формулы, связывающие интеграл по объему  $V$  с интегралом по замкнутой поверхности  $S$ ,

ограничивающей этой объем ( $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{n}}dS$ , где  $\hat{\mathbf{n}}$  — единичный вектор, направленный наружу по нормали к поверхности)

$$\iiint \nabla f dV = \iint \hat{\mathbf{n}} f dS, \quad (24)$$

$$\iiint \nabla \cdot \mathbf{A} dV = \iint \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{A} dS \quad \begin{array}{c} \text{теорема} \\ \text{Остроградского—Гаусса} \\ \text{о дивергенции} \end{array} \quad (25)$$

$$\iiint \nabla \cdot \mathbf{T} dV = \iint \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T} dS, \quad (26)$$

$$\iiint \nabla \times \mathbf{A} dV = \iint \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{A} dS, \quad (27)$$

$$\iiint (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) dV = \iint \hat{\mathbf{n}} \cdot (f \nabla g - g \nabla f) dS \quad \text{теорема Грина} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \iint [\mathbf{A} \cdot (\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B})) - \mathbf{B} \cdot (\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}))] dV = \\ = \iint \hat{\mathbf{n}} \cdot [\mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B})] dS. \end{aligned} \quad (29)$$

Ряд формул позволяет связать интеграл по незамкнутой поверхности  $S$  с интегралом по контуру  $C$ , который ограничивает эту поверхность ( $ds$  — элемент контура):

$$\iint \hat{\mathbf{n}} \times \nabla f dS = \oint f ds, \quad (30)$$

$$\iint (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \oint \mathbf{A} \cdot ds, \quad \text{теорема Стокса} \quad (31)$$

$$\iint (\hat{\mathbf{n}} \times \nabla) \times \mathbf{A} dS = - \oint \mathbf{A} \cdot ds, \quad (32)$$

$$\iint \hat{\mathbf{n}} \cdot (\nabla f \times \nabla g) dS = \oint f \nabla g \cdot ds = - \oint g \nabla f \cdot ds. \quad (33)$$

### 3. СИСТЕМЫ КООРДИНАТ

В ортогональной системе криволинейных координат  $q_1$ ,  $q_2$  и  $q_3$  (с ортогональными единичными векторами  $\hat{\mathbf{e}}_1$ ,  $\hat{\mathbf{e}}_2$  и  $\hat{\mathbf{e}}_3$ ) дифференциал радиуса-вектора есть

$$d\mathbf{r} = \hat{\mathbf{e}}_1 h_1 dq_1 + \hat{\mathbf{e}}_2 h_2 dq_2 + \hat{\mathbf{e}}_3 h_3 dq_3, \quad (34)$$

а дифференциалы элемента  $ds$  и элемента объема  $d\tau$  имеют вид

$$ds = [(h_1 dq_1)^2 + (h_2 dq_2)^2 + (h_3 dq_3)^2]^{1/2}, \quad (35)$$

$$d\tau = h_1 h_2 h_3 dq_1 dq_2 dq_3. \quad (36)$$

Величины  $h_1$ ,  $h_2$  и  $h_3$  в наиболее распространенных системах координат равны

$$h_1=1 \quad h_2=1 \quad h_3=1 \quad \text{в декартовых координатах } x,y,z, \quad (37a)$$

$$h_1=1 \quad h_2=\rho \quad h_3=1 \quad \text{в цилиндрических координатах } \rho,\varphi,z, \quad (37b)$$

$$h_1=1 \quad h_2=r \quad h_3=r\sin\theta \quad \text{в сферических координатах } r,\theta,\varphi. \quad (37c)$$

В декартовых координатах  $x, y, z$  дифференциалы записываются в виде

$$dr = \hat{i}dx + \hat{j}dy + \hat{k}dz, \quad (38)$$

$$ds = [dx^2 + dy^2 + dz^2]^{1/2}, \quad (39)$$

$$d\tau = dx \, dy \, dz, \quad (40)$$

а дифференциальные операторы имеют вид

$$\nabla\Psi = \hat{j}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial\Psi}{\partial z}, \quad (41)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}, \quad (42)$$

$$\nabla \times \mathbf{V} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_x & V_y & V_z \end{vmatrix}, \quad (43)$$

$$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}. \quad (44)$$

В цилиндрических координатах (рис. 27.1) соответственно,

$$x = \rho \cos \varphi \quad \rho = (x^2 + y^2)^{1/2},$$

$$y = \rho \sin \varphi \quad \varphi = \operatorname{arctg} y/x, \quad (45)$$

$$z = z \quad z = z,$$

а единичные векторы и дифференциалы

$$\hat{\mathbf{e}}_\rho = \hat{i} \cos \varphi + \hat{j} \sin \varphi, \quad (46)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\varphi = -\hat{i} \sin \varphi + \hat{j} \cos \varphi,$$

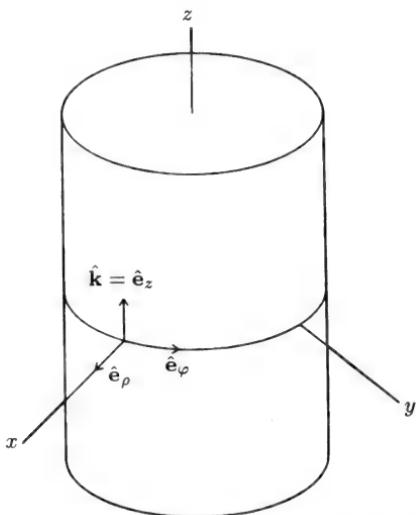


Рис. 27.1. Единичные векторы  $\hat{e}_\rho$ ,  $\hat{e}_\varphi$  и  $\hat{e}_z = \hat{k}$  цилиндрической системы координат.

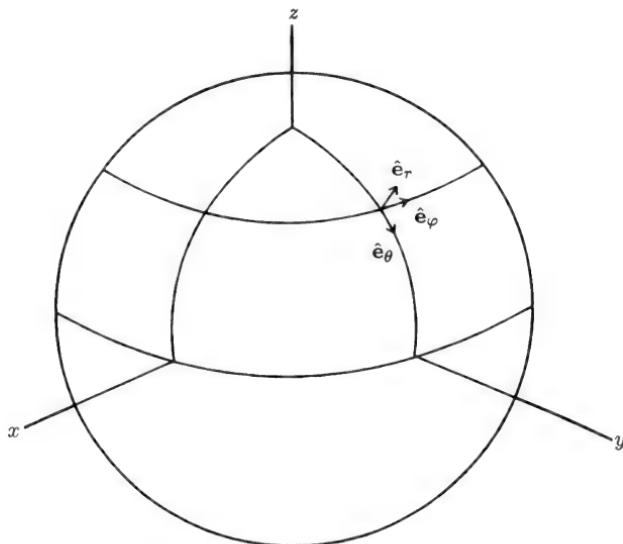


Рис. 27.2. Единичные векторы  $\hat{e}_r$ ,  $\hat{e}_\theta$  и  $\hat{e}_\varphi$  сферической системы координат.

$$\hat{\mathbf{i}} = \hat{\mathbf{e}}_\rho \cos \varphi - \hat{\mathbf{e}}_\varphi \sin \varphi, \quad (47)$$

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{e}}_\rho \sin \varphi + \hat{\mathbf{e}}_\varphi \cos \varphi,$$

$$d\mathbf{r} = \hat{\mathbf{e}}_\rho d\rho + \hat{\mathbf{e}}_\varphi \rho d\varphi + \hat{\mathbf{k}} dz, \quad (48)$$

$$ds = [d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + dz^2]^{1/2}, \quad (49)$$

$$d\tau = \rho d\rho d\varphi dz; \quad (50)$$

дифференциальные операторы имеют вид

$$\nabla \Psi = \hat{\mathbf{e}}_\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_\varphi}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + \hat{\mathbf{k}} \frac{\partial \Psi}{\partial z}, \quad (51)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho V_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{V_z}{\partial z}, \quad (52)$$

$$\nabla \times \mathbf{V} = \frac{1}{\rho} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_\rho & \rho \hat{\mathbf{e}}_\varphi & \hat{\mathbf{k}} \\ \frac{\partial}{\partial \rho} & \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_\rho & \rho V_\varphi & V_z \end{vmatrix}, \quad (53)$$

$$\nabla^2 V = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2}. \quad (54)$$

В полярных координатах (рис. 27.2) выражения для векторов и дифференциалов имеют вид

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, & \rho &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \\ y &= \sin \theta \sin \varphi, & \theta &= \arccos z/r, \\ z &= \cos \theta, & \varphi &= \arctg y/x, \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_r &= \hat{\mathbf{i}} \sin \theta \cos \varphi + \hat{\mathbf{j}} \sin \theta \sin \varphi + \hat{\mathbf{k}} \cos \theta, \\ \hat{\mathbf{e}}_\theta &= \hat{\mathbf{i}} \cos \theta \cos \varphi + \hat{\mathbf{j}} \cos \theta \sin \varphi - \hat{\mathbf{k}} \sin \theta, \\ \hat{\mathbf{e}}_\varphi &= -\hat{\mathbf{i}} \sin \varphi + \hat{\mathbf{j}} \cos \varphi, \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{i}} &= \hat{\mathbf{e}}_r \sin \theta \cos \varphi + \hat{\mathbf{e}}_\theta \cos \theta \cos \varphi - \hat{\mathbf{e}}_\varphi \sin \varphi, \\ \hat{\mathbf{j}} &= \hat{\mathbf{e}}_r \sin \theta \sin \varphi + \hat{\mathbf{e}}_\theta \cos \theta \sin \varphi + \hat{\mathbf{e}}_\varphi \cos \varphi, \\ \hat{\mathbf{k}} &= \hat{\mathbf{e}}_r \cos \theta - \hat{\mathbf{e}}_\theta \sin \theta, \end{aligned} \quad (57)$$

$$dr = \hat{\mathbf{e}}_r dr + \hat{\mathbf{e}}_\theta r d\theta + \hat{\mathbf{e}}_\varphi r \sin \theta d\varphi, \quad (58)$$

$$ds = [dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2]^{1/2}, \quad (59)$$

$$d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi, \quad (60)$$

а дифференциальные операторы

$$\nabla \Psi = \hat{\mathbf{e}}_r \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_\theta}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}, \quad (61)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 V_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta V_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi}, \quad (62)$$

$$\nabla \times \mathbf{V} = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_r & r \hat{\mathbf{e}}_\varphi & r \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_\varphi \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ V_r & r V_\theta & r \sin \theta V_\varphi \end{vmatrix}, \quad (63)$$

$$\nabla^2 V = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial \varphi^2}. \quad (64)$$

## 4. ОПРЕДЕЛИТЕЛИ (ДЕТЕРМИНАНТЫ)

Величину определителя  $3 \times 3$  можно найти путем разложения на миноры

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = a_1(b_2 c_3 - b_3 c_2) - a_2(b_1 c_3 - b_3 c_1) + a_3(b_1 c_2 - b_2 c_1). \quad (65)$$

Величина определителя равна нулю при условии, что:

- 1) две строки или два столбца совпадают друг с другом;
- 2) все элементы какой-либо строки (или столбца) равны нулю.

Величина определителя не изменится, если

- 1) к элементам одной из строк, умноженным на некоторую постоянную, добавить соответствующие элементы другой строки;
- 2) к элементам одного из столбцов, умноженным на некоторую постоянную, добавить соответствующие элементы другого столбца.

Если все элементы строки (или, соответственно, все элементы столбца) умножить на постоянную, то такая операция эквивалентна умножению величины определителя на эту постоянную.

## 5. МАТРИЦЫ

Матрице  $2 \times 2$ , записанной в стандартной форме

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (66)$$

можно сопоставить транспонированную матрицу  $\tilde{M}$

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}, \quad (67)$$

комплексно-сопряженную матрицу  $M^*$

$$M^* = \begin{pmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{pmatrix}, \quad (68)$$

эрмитово-сопряженную матрицу  $M^\dagger$

$$M^\dagger = \tilde{M}^* = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}, \quad (69)$$

а также в некоторых случаях обратную матрицу  $M^{-1}$

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (70)$$

которая определяется соотношением  $M \cdot M^{-1} = M^{-1} \cdot M = I$ , где  $I$  — единичная матрица

$$MM^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} aA+bC & aB+bD \\ cA+dC & cB+dD \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (71)$$

Из наиболее важных операций, связанных с матрицами, следует выделить следующие три: умножение матриц (согласно предыдущей формуле), сложение матриц

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} \quad (72)$$

и, наконец, прямое произведение матриц, которое имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (73)$$

Матрицы гамильтониана  $\mathcal{H}$  — эрмитовы, т. е. обладают свойством

$$\mathcal{H}_{ij} = \mathcal{H}_{ji}^*. \quad (74)$$

Другими словами, матрица  $\mathcal{H}^\dagger$  эрмитовой матрицы  $\mathcal{H}$  равна исходной

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger. \quad (75)$$

Из (74) следует, что все диагональные элементы эрмитовой матрицы являются действительными числами и ее собственные значения также действительны. Действительная эрмитова матрица симметрична.

К матрицам преобразования относятся унитарные матрицы  $U$ , которые обладают следующим свойством: матрица, обратная унитарной, совпадает с эрмитово-сопряженной:

$$U^{-1} = U^\dagger, \quad (76)$$

или

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \quad U^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha^* & \gamma^* \\ \beta^* & \delta^* \end{pmatrix}. \quad (77)$$

Столбцы и строки унитарной матрицы удовлетворяют условиям ортогональности

$$\sum U_{ij} U_{ik}^* = \sum U_{ji} U_{ki}^* = \mathbb{I} \delta_{jk} \quad (78)$$

(где  $\mathbb{I}$  — единичная матрица), откуда можно показать, что

$$\beta = -\gamma^* \quad (79)$$

и, следовательно, унитарная матрица  $2 \times 2$   $U$  с определителем, равным  $+1$ , имеет вид

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (80)$$

с условием ортогональности

$$\alpha \alpha^* + \beta \beta^* = 1. \quad (81)$$

Комплексные числа  $\alpha$  и  $\beta$  можно записать в явном виде через действительные и мнимые части  $e_j$  элементов матрицы  $U$

$$\alpha = e_0 + ie_3, \quad (82)$$

$$\beta = e_2 + ie_1. \quad (83)$$

Числа  $e_j$ , называемые параметрами Эйлера (или параметрами Кейли — Клейна) удовлетворяют условию нормировки

$$e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1, \quad (84)$$

благодаря которому для определения вида матрицы  $U$  необходимо задать только три независимых параметра.

Действительная унитарная матрица  $R$  называется ортогональной, если ее обратная матрица совпадает с транспонированной, т. е.

$$R^{-1} = \tilde{R}, \quad (85)$$

а столбцы и строки ортогональны и нормированы

$$\sum_i R_{ij} R_{ik} = \sum_i R_{ji} R_{ki} = \mathbb{I} \delta_{jk}. \quad (86)$$

В качестве примера ортогональной матрицы  $R$  можно привести матрицу вращения в трехмерной декартовой системе координат.

При переходе от одной системы координат к другой действительные матрицы  $M$  и эрмитовы матрицы  $\mathcal{H}$  преобразуются в матрицы  $M'$  и  $\mathcal{H}'$  при помощи введенных выше унитарных ( $U$ ) и ортогональных ( $R$ ) матриц:

$$R^{-1} M R = M', \quad (87)$$

$$U^{-1} \mathcal{H} U = \mathcal{H}'. \quad (88)$$

Эти преобразования не изменяют величину следа матрицы  $\text{Tr}$ , т. е. суммы диагональных элементов

$$\text{Tr} = \sum M_{ii} = \sum M'_{ii}, \quad (89)$$

$$\text{Tr} = \sum \mathcal{H}_{ii} = \sum \mathcal{H}'_{ii}. \quad (90)$$

С другой стороны, преобразования (87) — (88) можно использовать для приведения соответствующих матриц к диагональному виду, т. е. для нахождения собственных значений. Столбцы матрицы преобразования состоят из собственных векторов преобразования.

Рассмотрим, например, задачу приведения к диагональному виду эрмитовой матрицы  $2 \times 2 \mathcal{H}$  с помощью преобразования (88) с унитарной матрицей (80)

$$\begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (91)$$

Два вектора-столбца

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} -\beta^* \\ \alpha^* \end{pmatrix} \quad (92)$$

являются собственными векторами исходной эрмитовой матрицы  $\mathcal{H}$ .

Собственные значения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  могут быть найдены из определителя векового уравнения

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \lambda & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (93)$$

которое для рассматриваемой матрицы  $2 \times 2$  переходит в квадратное уравнение с решениями

$$\lambda = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}[(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2]^{1/2}. \quad (94)$$

В случае, когда недиагональный элемент  $H_{12}$  мал по сравнению с диагональными элементами  $H_{11}$  и  $H_{22}$ , а также с их разностью  $H_{11} - H_{22} = \Delta$ , для  $\lambda = E_1$  и  $E_2$  получаются следующие приближенные значения:

$$E_1 = H_{11} + H_{12}^2/\Delta, \quad (95)$$

$$E_2 = H_{22} - H_{12}^2/\Delta. \quad (96)$$

## 6. МАТРИЦЫ ПАУЛИ И СПИНОРЫ

Спиновые матрицы Паули

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (97)$$

имеют редкую особенность: они являются и унитарными, и эрмитовыми. Матрицы Паули обладают свойством циклической перестановки индексов

$$\sigma_i \sigma_j = i \sigma_k \quad (98)$$

и антисимметричности

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\mathbb{I} \delta_{ij}. \quad (99)$$

Квадрат каждой из этих матриц представляет собой единичную матрицу

$$\sigma_i^2 = \mathbb{I}. \quad (100)$$

Матрицы Паули служат представлением вектора спина  $\frac{1}{2}$ , т. е.

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\sigma \quad (S = \frac{1}{2}), \quad (101)$$

а также представлением  $2 \times 2$  радиуса-вектора  $\mathbf{r}$

$$M_r = \begin{pmatrix} z & x + iy \\ x - iy & z \end{pmatrix} = x\sigma_1 + y\sigma_2 + z\sigma_3. \quad (102)$$

Унитарная матрица половинных углов  $R$

$$R_x = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & i \sin \theta/2 \\ i \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \quad (103)$$

позволяет осуществить преобразование поворота матрицы  $M_r$  посредством преобразования подобия

$$R_i^{-1} M_r R_i = M'_r \quad (104)$$

в матрицу  $M'_r(x', y', z')$ .

Спиноры представляют собой двухкомпонентные комплексные векторы  $u, v$  в пространстве  $2 \times 2$ , называемом спинорным пространством. При преобразовании координат они преобразуются (подобно векторам) при помощи унитарной матрицы (80), т. е.

$$\begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \quad (105)$$

что соответствует

$$\begin{aligned} u' &= \alpha u - \beta^* v, \\ v' &= \beta u + \alpha^* v. \end{aligned} \quad (106)$$

Из выражения (103) следует, что в спинорном пространстве совпадение достигается при повороте на  $4\pi$  (а не на  $2\pi$ , как обычно), поскольку только при таком повороте восстанавливается исходная конфигурация спиноров. Это означает наличие гомоморфизма, который в данном случае представляет собой отображения двух унитарных матриц  $2 \times 2 U$  в одну матрицу  $3 \times 3$  ортогональных вращений  $R$ . Другими словами, оба угла ( $\theta$  и  $\theta + 2\pi$ ) матрицы  $U(\theta)$  (80) и матрицы  $R_x$  (103) отображаются углом  $\theta$  матрицы  $3 \times 3$  вращения  $R$  (3) гл. 3.

Спиноры играют важную роль в задачах квантовой механики, так как две компоненты спинора ( $u$  и  $v$ ) могут представлять два спиновых состояния электрона, соответствующих  $m = +\frac{1}{2}$  и  $m = -\frac{1}{2}$ .

## 7. ТЕНЗОРЫ

Тензоры нулевого, первого и второго рангов называются соответственно скаляром  $S$ , вектором  $\mathbf{V}$  и просто тензором  $\mathbf{T}$ . Каждая из этих величин может иметь «псевдоаналог» (псевдоскаляр  $S_p$ , псевдовектор  $\mathbf{V}_p$ , псевдотензор  $\mathbf{T}_p$ ) в зависимости от поведения при операции пространственной инверсии ( $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$ ). Эта операция  $P$  преобразует указанные величины следующим образом:

$$\begin{aligned} PS &= S, & PS_p &= -S_p, \\ P\mathbf{V} &= -\mathbf{V}, & P\mathbf{V}_p &= \mathbf{V}_p, \\ P\mathbf{T} &= \mathbf{T}, & P\mathbf{T}_p &= -\mathbf{T}_p. \end{aligned} \quad (107)$$

Аналогичные соотношения можно выписать и для тензоров более высокого ранга. Примером псевдовектора является векторное произведение двух обычных векторов.

В декартовых координатах тензор  $A_{xx}, A_{xy}, \dots$  имеет девять компонент и может быть разложен на три разные величины: однокомпонентный скаляр  $S$ , который представляет собой след

$$S = A_{xx} + A_{yy} + A_{zz}, \quad (108)$$

трехкомпонентный (псевдо)вектор  $\mathbf{V}$ , представляющий собой антисимметричную часть тензора, с составляющими вида

$$V_x = A_{yz} - A_{zy} \quad (109)$$

и тензор с нулевым следом и пятью независимыми компонентами типа

$$A_{xx} \text{ и } A_{xy} + A_{yx}, \quad (110)$$

который соответствует симметричной части исходного тензора в декартовых координатах. На шесть компонент (110) наложено дополнительное условие в виде равенства нулю следа, вследствие чего независимы только пять компонент.

Три компоненты вектора  $\mathbf{V}$  можно выразить через его абсолютное значение

$$V = (V_x^2 + V_y^2 + V_z^2)^{1/2} \quad (111)$$

и два полярных угла ( $\theta$  и  $\phi$ ), задающих направление вектора в пространстве. Пять компонент тензора второго ранга с нулевым следом можно однозначно задать тремя эйлеровыми углами  $\theta, \phi$  и  $\psi$  (которые приводят тензор к диагональному виду), наибольшим диагональным элементом ( $T_{zz}$ ) и разностью двух других диагональных элементов ( $T_{xx} - T_{yy}$ ) после диагонализации.

Скалярное произведение двух векторов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  означает свертку  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  контравариантного вектора  $\mathbf{A}$  и ковариантного вектора  $\mathbf{B}$  (или наоборот):

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A^1 B_1 + A^2 B_2 + A^3 B_3 = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = B^1 A_1 + B^2 A_2 + B^3 A_3. \quad (112)$$

Если ковариантные и контравариантные компоненты векторов не совпадают (как в случае декартовых координат), то свертка невозможна ни для одной пары ковариантных (ни соответственно контравариантных) векторов, так как всегда будут присутствовать перекрестные члены типа  $A_1 B_3$  или  $A^2 B^1$ , соответственно. Происхождение перекрестных членов обусловлено тем, что базисные векторы в общем случае не будут взаимно ортогональны. Аналогичная проблема возникает и для тензоров более высоких рангов.

При преобразовании системы координат контравариантный вектор с компонентами  $V^i = V^1, V^2, \dots$  в новой системе имеет вид

$$V^{i'} = \sum_j \left( \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} \right) V^j, \quad (113)$$

а ковариантный  $V_i = V_1, V_2, \dots$

$$V'_i = \sum_j \left( \frac{\partial x_j}{\partial x'_i} \right) V_j. \quad (114)$$

Преобразования контравариантных, смешанных и ковариантных тензоров второго ранга (соответственно  $T^{ij}$ ,  $T_j^i$  и  $T_{ij}$ ), даются следующими формулами:

$$T^{ij'} = \sum_{k\ell} \left( \frac{\partial x'_i \partial x'_j}{\partial x_k \partial x_\ell} \right) T^{k\ell} \text{ для контравариантных тензоров,} \quad (115)$$

$$T_j^{i'} = \sum_{k\ell} \left( \frac{\partial x'_i \partial x_\ell}{\partial x_k \partial x'_j} \right) T_\ell^k \text{ для смешанных тензоров,} \quad (116)$$

$$T'_{ij} = \sum_{k\ell} \left( \frac{\partial x_k \partial x_\ell}{\partial x'_i \partial x'_j} \right) T_{k\ell} \text{ для ковариантных тензоров,} \quad (117)$$

которые легко обобщаются для тензоров более высокого ранга.

Различие между ковариантными и контравариантными величинами играет существенную роль в ряде конкретных разделов физики.

1. В физике твердого тела косоугольные координаты прямой и обратной кристаллических решеток образуют ковариантно-контравариантную пару.
2. В квантовой механике такую пару образуют кет-векторы  $|i\rangle$  и бра-векторы  $\langle j|$ .
3. Такую же пару образуют вектор-строка и вектор-столбец.
4. В специальной теории относительности иногда используются две системы обозначений ( $\mathbf{r}, ct$  и  $\mathbf{r}, -ct$ ), образующие ковариантно-контравариантную пару. Ковариантные и контравариантные векторы в теории относительности совпадают лишь при использовании системы обозначений ( $\mathbf{r}, ict$ ).

## 8. БЕСКОНЕЧНЫЕ РЯДЫ

В этом разделе приведены некоторые соотношения и теоремы, относящиеся к бесконечным рядам. Рассмотрим частичную сумму

$$s_i = \sum u_n. \quad (118)$$

В соответствии с критерием Коши мы будем говорить, что эта сумма сходится к пределу  $S$

$$\lim s_i = S, \quad (119)$$

если для каждого  $\varepsilon > 0$  существует определенное значение  $N$ , для которого

$$|S - s_i| < \varepsilon \quad \text{при } i > N. \quad (120)$$

Особо следует выделить два важных случая: геометрический ряд, который при  $r < 1$  сходится к пределу

$$\sum r^{n-1} = \frac{1}{1-r} \quad (121)$$

и расходится при  $r \geq 1$ , и расходящийся гармонический ряд

$$\sum n^{-1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \dots \quad (122)$$

Знакопеременный ряд  $u_n$ , для которого сумма  $\sum u_n$  сходится, а сумма  $\sum |u_n|$  расходится, называется условно сходящимся. Ряд (122) сходится условно. Сходящийся ряд  $\sum |u_n|$  называется абсолютно сходящимся. Более тонким понятием является однородная сходимость функционального ряда  $\sum u_n(x)$  на некотором интервале значений аргумента  $x$ .

Важную роль в теории рядов играет постоянная Эйлера — Маскерони  $\gamma$ , определяемая как предел при  $n \rightarrow \infty$  выражения

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - \ln(n) \right] = 0,577216\dots, \quad (123)$$

в котором обе суммы  $s_n = \sum m^{-1}$  и сумма ряда натуральных логарифмов  $n$  быстро расходятся; однако ряд, составленный из их разности, сходится.

## 9. РЯДЫ ФУРЬЕ

Разложение функции  $f(x)$  в ряд Фурье имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_m a_m \cos mx + \sum_m b_m \sin mx, \quad (124)$$

где  $m$  — последовательность целых чисел, а коэффициенты при тригонометрических функциях определяются формулами

$$a_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cos mt dt, \quad (125)$$

$$b_m = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \sin mt dt \quad (126)$$

с учетом условия ортогональности

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin mx \sin px dx &= \pi \delta_{mp} \quad m \neq 0, \\ \int_0^{2\pi} \cos mx \cos px dx &= \pi \delta_{mp} \quad m \neq 0, \\ \int_0^{2\pi} \sin mx \cos px dx &= 0. \end{aligned} \quad (127)$$

Ряд Фурье можно записать в виде

$$f(x) = \sum_n c_n e^{inx}, \quad (128)$$

где величины  $c_n$  вычисляются по аналогии с (125) — (127), а связь коэффициентов  $c_n$ ,  $a_n$  и  $b_n$  устанавливается достаточно просто. В

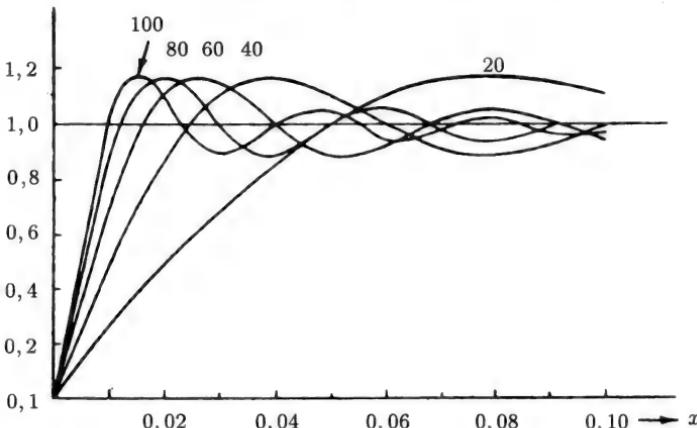
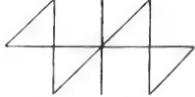
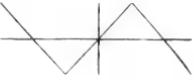
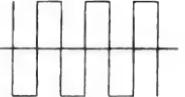


Рис. 27.3. Явление Гиббса — резкие выбросы, возникающие при разложении в ряд Фурье прямоугольного импульса вблизи точки разрыва (цифры означают число членов ряда). (Из книги: Arfken G., Weber H.J., Mathematical Methods for Physicists, 4th ed., Academic Press, New York, 1995; имеется перевод: Г. Арфкен. Математические методы в физике. — М., Атомиздат, 1970, стр. 579.)

Таблица 27.1. Примеры разложения некоторых периодических функций в ряд Фурье<sup>1</sup>.

Название функции	Значения $m$	Ряд	Вид функции
Пилообразный сигнал	$1, 2, 3, \dots$	$\pi - 2 \sum \frac{\sin mx}{m}$	
Центрированный пилообразный сигнал	$1, 2, 3, \dots$	$2 \sum (-1)^{m+1} \frac{\sin mx}{m}$	
Центрированный треугольный сигнал	$1, 3, 5, \dots$	$\frac{4}{\pi} \sum (-1)^{\frac{m+1}{2}} \frac{\sin mx}{m^2}$	
Центрированный прямоугольный сигнал	$1, 3, 5, \dots$	$\frac{4}{\pi} \sum \frac{\sin mx}{m}$	
«Выпрямленный» синусоидальный сигнал	$2, 4, 6, \dots$	$\frac{2}{\pi} - \frac{4}{\pi} \sum \frac{\cos mx}{m^2 - 1}$	

<sup>1</sup> И. Н. Бронштейн, К. А. Семенджев, Справочник по математике. — М.: Наука, 1964 (10-е изд.)

большинстве случаев ряды Фурье позволяют получать приближенные значения функций с очень высокой точностью, однако вблизи точек разрыва частичные суммы рядов Фурье могут значительно отклоняться от значения функции, образуя своеобразный «выброс», как показано на рис. 27.3 для фурье-разложения прямоугольного импульса. Это поведение в окрестности точек разрыва называется явлением Гиббса. Ряды Фурье для некоторых функций приведены в табл. 27.1.

## 10. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Ряды Фурье (124) удобны для представления периодических функций  $f(x)$  в виде суммы членов типа  $\sin mx$  и  $\cos mx$ , где  $m$  — целые числа. Если же функция  $f(x)$  не является периодической, то суммирование по  $m$  и  $n$  в (124) и (128), соответственно, можно заменить интегрированием по  $\omega$ . Для удобства можно воспользоваться выражением (128) с заменой переменной  $x$  на  $t$ , что приводит к

уравнению для  $f(t)$

$$f(t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (129)$$

в котором дискретные коэффициенты  $c_n$  для целочисленных значений  $n$  в (128) заменены непрерывной функцией  $F(\omega)$  переменной  $\omega$ , изменяющейся в диапазоне от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Представление функции  $f(x)$  рядом (128) заменяется интегральным преобразованием (129). Можно записать и обратное преобразование

$$F(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{i\omega t} dt. \quad (130)$$

Нормировочный коэффициент  $(2\pi)^{1/2}$  обеспечивает полную взаимную симметрию обратного преобразования  $F(\omega)$  и исходной функции  $f(t)$ , за исключением знака в экспоненте.

Преобразования (129) и (130) могут использоваться для широкого класса непериодических функций. В зависимости от четности исходной функции  $f(x)$ , т. е. операции  $Pf(t) = f(-t)$ , имеем

$$Pf_c(t) = f_c(t) \quad \text{для четных функций,}$$

$$Pf_s(t) = -f_s(t) \quad \text{для нечетных функций}$$

и экспоненциальные фурье-преобразования (129) – (130) можно заменить косинус- и синус-преобразованиями Фурье соответственно, имеющими для четных функций вид

$$f_c(t) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^{\infty} F_c(\omega) \cos \omega t d\omega, \quad (132a)$$

$$F_c(\omega) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^{\infty} f_c(t) \cos \omega t dt, \quad (132b)$$

а для нечетных

$$f_s(t) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^{\infty} F_s(\omega) \sin \omega t d\omega, \quad (133a)$$

$$F_s(\omega) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^{\infty} f_s(t) \sin \omega t dt. \quad (133b)$$

Если функция  $f(t)$  локализована в интервале  $\tau$ , то ее фурье-образ  $F(\omega)$  будет локализован в области  $\Delta\omega$ , причем эти области локализации связаны между собой соотношением неопределенности

$$\tau \Delta\omega \approx 1, \quad (134)$$

аналогичным принципу неопределенности в квантовой механике.

Полезно рассмотреть несколько примеров преобразования Фурье. Выбрав в качестве  $F(\omega)$  в (129) функцию  $e^{i\omega x}$ , мы можем получить (после незначительной перенормировки) фурье-образ дельта-функции  $\delta(t - x)$

$$\delta(t - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-x)} d\omega, \quad (135)$$

где

$$\delta(t - x) = \begin{cases} \infty & t = x, \\ 0 & t \neq x, \end{cases} \quad (136)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - x) dx = 1. \quad (137)$$

Дельта-функция  $\delta(t - x)$  локализована в точке, а ее фурье-образ  $e^{-i\omega(t-x)}$  полностью делокализован, что соответствует предельному случаю приведенного выше условия неопределенности (134).

В квантовой механике волновая функция  $g(p)$  в пространстве импульсов связана с волновой функцией  $\psi(x)$  в координатном пространстве соотношением типа преобразования Фурье. В качестве примера для основного состояния атома водорода имеем

$$\psi(\mathbf{r}) = (1/\pi a_0)^{-1/2} e^{-r/a_0}, \quad (138a)$$

$$g(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} \frac{(2\hbar/a_0)^{\frac{5}{2}}}{[p^2 + (\hbar/a_0)^2]^{\frac{3}{2}}}. \quad (138b)$$

Соотношение неопределенности в данном случае

$$\Delta x \Delta p_x \approx \hbar \quad (139)$$

известно под названием соотношения Гейзенберга. Волновой пакет конечной длины (соответствующий  $N$  периодам синусоидальной волны)  $f(t)$  может быть записан в виде

$$f(t) = \begin{cases} \sin \omega_0 t & |t| < \tau, \\ 0 & |t| > \tau, \end{cases} \quad (140)$$

где  $\tau = N\pi/\omega_0$ . После синус-преобразования Фурье он переходит в

$$F(\omega) = (2/\pi)^{1/2} \left\{ \frac{\sin[\omega_0 - \omega]\tau}{2(\omega_0 - \omega)\tau} - \frac{\sin[(\omega_0 + \omega)\tau]}{2(\omega_0 + \omega)\tau} \right\}. \quad (141)$$

График квадрата этой функции аппроксимирует огибающую на рис. 14.7 гл. 14, где он соответствовал картине оптической дифракции на отдельной широкой щели. В случае сверхпроводимости такая

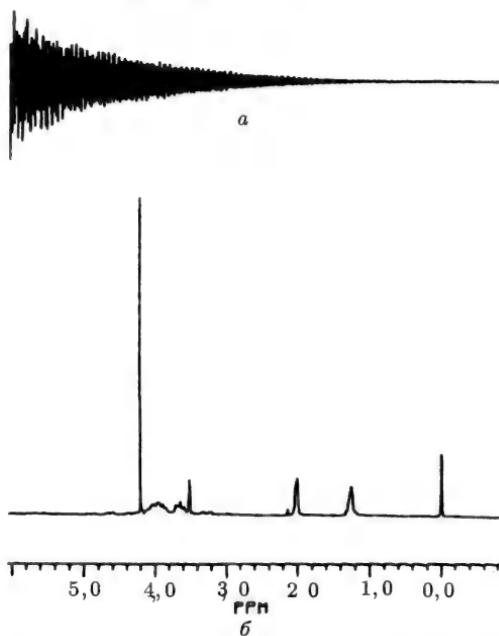


Рис. 27.4. Спектр ядерного магнитного резонанса (ЯМР) липосахарида оболочки клеток *Rhizobium*: (а) сканирование по частотам; (б) временная развертка. (Из книги: Poole C. P., Farach H. A., Theory of Magnetic Resonance, Wiley, New York, 2nd Ed., 1987, p. 328.)

картина соответствует дифракции Франунгофера на джозефсоновском переходе.

В спектроскопии часто используется то обстоятельство, что косинус-преобразованием Фурье функции Лоренца  $1/(1+y^2)$  служит экспонента  $e^{-x}$ , как в случае (138). Это в свою очередь означает, что лоренцева форма линии  $Y(\omega)$  в интервале частот  $\Delta\omega$  (с центром при  $\omega_0$ )

$$Y(\omega) = \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Delta\omega)^2} \quad (142)$$

соответствует колебаниям, затухающим во времени по экспоненциальному закону  $e^{-t/\tau}$ . Классический анализ спектра связан с частотным сканированием типа изображенного на рис. 27.4, б. Из рисунка видно, что большая часть времени эксперимента затрачивается на сканирование в промежутках между резонансными линиями,

т. е. областей, не содержащих полезной информации. Более эффективно облучать образец последовательными импульсами, содержащими широкий спектр частот. В результате удается получить временной спектр типа показанного на рис. 27.4,а. Этот спектр на первый взгляд также не содержит полезной информации, однако после фурье-преобразования он позволяет выделить область частот, показанную в нижней части рисунка. При этом значительно возрастает чувствительность, поскольку все время облучения образца затрачивается на получение информации о спектре. В настоящее время практически вся инфракрасная и ЯМР-спектроскопия основана на фурье-преобразовании.

Сто лет назад основной областью применения фурье-преобразования была кристаллография, что позволяло определять расположение атомов в твердом теле, используя это преобразование применительно к измеренным расстояниям между кристаллографическими плоскостями. В зонной теории характеристики зон Бриллюэна в импульсном пространстве могут быть найдены фурье-преобразованием кристаллографических данных, полученных в координатном пространстве.

## 11. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Интегральные преобразования связывают уравнением две функции  $f(s)$  и  $F(t)$ :

$$f(s) = \int_a^b F(t)K(s, t)dt, \quad (143)$$

где функция  $f(s)$  называется (интегральным) образом функции  $F(t)$ , а функция  $K(s, t)$  — ядром преобразования. В рассмотренном выше преобразовании Фурье [(129), (130)] ядром преобразования являлась функция  $e^{ist}$ . Другими примерами интегральных преобразований могут служить преобразования Лапласа [ $K(s, t) = e^{st}$ ], Меллина [ $K(s, t) = s^{-t}$ ] и Ганкеля [ $K(s, t) = tJ_n(st)$ ]. Наибольшее распространение получило преобразование Лапласа  $\mathcal{L}\{F(t)\}$ , определяемое уравнением

$$\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s) = \int_0^\infty e^{st} F(t)dt. \quad (144)$$

Список наиболее часто используемых преобразований Лапласа приводится в табл. 27.2.

Таблица 27.2. Преобразование Лапласа некоторых функций.

Функция-оригинал $f(x)$	Функция-изображение $F(t)$	Ограничение применения
1.	$1$	$\delta(t)$
2.	$\frac{1}{s}$	$1$
3.	$\frac{n!}{s^{n+1}}$	$t^n$
4.	$\frac{1}{s-k}$	$e^{kt}$
5.	$\frac{1}{(s-k)^2}$	$te^{kt}$
6.	$\frac{s}{s^2-k^2}$	$\operatorname{ch} kt$
7.	$\frac{k}{s^2-k^2}$	$\operatorname{sh} kt$
8.	$\frac{s}{s^2+k^2}$	$\cos kt$
9.	$\frac{k}{s^2+k^2}$	$\sin kt$
10.	$\frac{s-a}{(s-a)^2+k^2}$	$e^{at} \cos kt$
11.	$\frac{k}{(s-a)^2+k^2}$	$e^{at} \sin kt$
12.	$\frac{s^2-k^2}{(s^2+k^2)^2}$	$t \cos kt$
13.	$\frac{2ks}{(s^2+k^2)^2}$	$t \sin kt$
14.	$(s^2+a^2)^{-1/2}$	$J_0(at)$
15.	$(s^2-a^2)^{-1/2}$	$I_0(at)$
16.	$\frac{1}{a} \operatorname{arcctg} \left( \frac{s}{a} \right)$	$j_0(at)$
17.	$\left. \begin{array}{l} \frac{1}{2a} \ln \frac{s+a}{s-a} \\ \frac{1}{a} \operatorname{arccth} \left( \frac{s}{a} \right) \end{array} \right\}$	$i_0(at)$
18.	$\frac{(s-a)^n}{s^{n+1}}$	$L_n(at)$
19.	$\frac{1}{s} \ln(s+1)$	$E_1(x) = -Ei(-x)$
20.	$\frac{\ln s}{s}$	$-\ln t - C$

Преобразование Лапласа первой ( $F'(t) = dF/dt$ ) и второй ( $F''(t) = d^2F/dt^2$ ) производных, можно легко получить, интегрируя по частям

$$\mathcal{L}\{F'(t)\} = s\mathcal{L}\{F(t)\} - F(0), \quad (145)$$

$$\mathcal{L}\{F''(t)\} = s^2\mathcal{L}\{F(t)\} - sF(0) - F'(0), \quad (146)$$

причем производная по  $t$  берется справа (со стороны положительных значений). Эти уравнения можно использовать для преобразования дифференциальных уравнений второго порядка в алгебраические уравнения. Примером может служить преобразование Лапласа  $f(s)$  для уравнения гармонического осциллятора. Если  $x(t) = F(t)$  и  $f(s) = \mathcal{L}\{x(t)\}$ , вместо дифференциального уравнения

$$m \frac{d^2}{dt^2}x(t) + kx(t) = 0 \quad (147)$$

с граничными условиями  $F(0) = x(0) = x_0$  и  $F'(0) = x'(0) = 0$  получим алгебраическое уравнение

$$ms^2f(s) - msx_0 + kf(s) = 0. \quad (148)$$

Учитывая, что  $k = m\omega_0^2$ , можно найти

$$f(s) = \frac{x_0 s}{s^2 + \omega_0^2}. \quad (149)$$

Решение исходного уравнения (147) в данном случае можно определить, просто подобрав в табл. 27.2 обратное преобразование Лапласа, соответствующее функции (149). Таковым является преобразование № 8 и

$$x(t) = x_0 \cos \omega_0 t. \quad (150)$$

Интегральное преобразование в общем виде

$$f(x) = \int_a^b F(t)K(x, t)dt \quad (151)$$

носит название интегрального уравнения Фредгольма первого рода, если функция  $f(x)$  известна, а функция  $F(t)$  неизвестна. Аналогично можно определить и уравнение Фредгольма второго рода

$$F(x) = f(x) + \lambda \int_a^b F(t)K(x, t)dt, \quad (152)$$

где функция  $f(x)$  снова считается известной. Два сходных интегральных уравнения представляют собой уравнение Вольтерры первого

$$f(x) = \int_a^x F(t)K(x, t)dt \quad (153)$$

и второго рода

$$F(x) = f(x) + \int_a^x F(t)K(x,t)dt. \quad (154)$$

Во всех приведенных уравнениях (151) — (154) функция  $f(x)$  и ядро преобразования  $K(x,t)$  считаются известными.

## 12. ФУНКЦИИ КОМПЛЕКСНОГО ПЕРЕМЕННОГО

В этом разделе мы рассмотрим некоторые характерные особенности функций комплексного переменного, которые широко используются при решении физических задач. Комплексная переменная  $z$  может быть записана как в декартовых координатах  $x, y$ , так и в полярных координатах  $r, \theta$ :

$$z = x + iy = re^{i\theta}. \quad (155)$$

Аналогичная запись справедлива и для функции  $w(z)$  от этой переменной

$$w(z) = u(x,y) + iv(x,y) = \rho e^{i\varphi}, \quad (156)$$

где опущены аргументы величин  $\rho(r, \theta)$  и  $\varphi(r, \theta)$ . Угол сохраняется при контурном отображении функций  $w(z)$  из плоскости  $u, v$  на плоскость  $x, y$ , и наоборот.

Функция называется аналитической, если значение ее производной  $df(z)/dz$  в точке  $x_0, y_0$  не зависит от направления приближения к этой точке в комплексной плоскости. Необходимым и достаточным условием аналитичности функции служат условия Коши—Римана

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{и} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (157)$$

Переменные  $u$  и  $v$  должны удовлетворять двумерному уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0. \quad (158)$$

В соответствии с интегральной теоремой Коши

$$\oint f(z)dz = 0, \quad (159)$$

где  $f(z)$  — аналитическая функция, не имеющая особенностей внутри замкнутого контура интегрирования  $C$ . Если внутри контура находится точка  $z_0$ , в которой функция не является аналитической,

то интегральная формула Коши приобретает вид (при условии, что обход контура осуществляется по часовой стрелке)

$$\oint \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0) \quad (160)$$

или

$$\oint f(z) dz = 2\pi i a_{-1}, \quad (161)$$

где вычет  $a_{-1}$  в точке  $z_0$  равен

$$a_{-1} = [(z - z_0)f(z)]_{z=z_0}. \quad (162)$$

Если контур интегрирования содержит особую точку, то коэффициент  $2\pi i$  в (161) следует заменить на  $\pm\pi i$ , обращая особое внимание на выбор знака. Если внутри контура  $C$  содержатся и другие особые точки  $z_0^n$ , то можно применить теорему о вычетах

$$\oint f(z) dz = 2\pi i \sum a_{-1}^n, \quad (163)$$

где каждый из вычетов  $a_{-1}^n$  вычисляется согласно формуле (162).

В окрестности точки  $z_0$  внутри контура  $C$  функция  $f(z)$  может быть представлена в виде разложения в ряд по степеням  $(z - z_0)^n$  с целочисленными показателями  $n$  от нуля до бесконечности

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (164)$$

где каждый коэффициент  $a_n$  можно определить либо из  $n$ -й производной  $f^{(n)}(z)$  в точке  $z_0$ , либо в виде интеграла по контуру  $C$

$$a_n = \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z') dz'}{(z' - z_0)^{n+1}}. \quad (165)$$

Если область аналитичности представляет собой кольцо (с внутренним радиусом  $r_1$  и внешним радиусом  $r_2$ ), то функция  $f(z)$  может быть разложена в ряд Лорана по степеням  $(z - z_0)^n$  с суммированием по всем целочисленным  $n$   $(-\infty, +\infty)$  в виде

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (166)$$

где коэффициенты  $a_n$  определяются формулой

$$a_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z') dz'}{(z' - z_0)^{n+1}}, \quad (167)$$

а  $C$  — произвольный контур интегрирования, охватывающий точку  $z_0$  и лежащий внутри кольцевой области  $r_1 < |z - z_0| < r_2$ . В пределе  $r_1 = 0$  ряд Лорана (166) сводится к ряду Тейлора (164).

### 13. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО КОНТУРУ

Теорема о вычетах (163) часто используется для вычисления определенных интегралов  $I$  вида

$$I = \int_A^B f(x)dx. \quad (168)$$

Для этого подынтегральная функция записывается в виде функции  $f(z)$  комплексной переменной, а интегрирование осуществляется по замкнутому контуру, который включает отрезок  $A - B$  действительной оси  $x$ . Значение интеграла (168) на интервале  $[A, B]$  равно умноженной на  $2\pi i$  сумме вычетов внутри замкнутого контура, из которой следует вычесть значение интеграла вдоль оставшейся части контура интегрирования. Например, интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \quad (169)$$

можно переписать в виде

$$I = \int_{-R}^R f(x)dx \quad (170)$$

с предельным переходом  $R \rightarrow \infty$ . Отрезок интегрирования можно замкнуть полуокружностью радиусом  $R$  в верхней полуплоскости, как это показано на рис. 27.5. Если функция  $f(z)$  спадает на этой полуокружности быстрее, чем  $1/z^2$ , то интеграл от  $f(z)$  вдоль полуокружности обратится при переходе  $R \rightarrow \infty$  в нуль, в результате чего для исходного интеграла по теореме о вычетах (163):

$$\oint f(z)dz = 2\pi i \sum_n a_{-1}^n. \quad (171)$$

В качестве конкретного примера рассмотрим определенный интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{1+x^2}. \quad (172)$$

Заменяя действительную переменную комплексной на всей плоскости, запишем подынтегральную функцию таким образом, чтобы выделить ее особые точки

$$I = \oint \frac{dz}{(z+i)(z-i)}. \quad (173)$$

Обе точки лежат на оси  $y$ . Особая точка (полюс)  $y = i$  лежит в верхней полуплоскости внутри контура интегрирования и в соответствии с (162) ей соответствует вычет  $a_{-1} = 1/2i$ . Другая особая

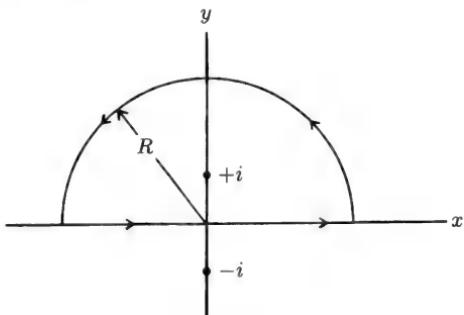


Рис. 27.5. Интегрирование в комплексной плоскости по контуру, включающему отрезок вдоль оси  $x$  с замыканием контура в верхней полуокружности полуокружностью радиусом  $R$ . Контур охватывает особую точку  $(x = 0, y = +i)$ , вне его остается особая точка  $(x = 0, y = -i)$ . Предельный переход  $R \rightarrow \infty$  позволяет найти значение интеграла.

точка  $y = -i$  лежит вне контура и не влияет на значение интеграла. Для интегрирования вдоль полуокружности используем полярные координаты

$$z = Re^{i\theta}, \quad dz = iRe^{i\theta}d\theta \quad (0 \leq \theta \leq \pi), \quad (174)$$

подставляя которые в (173) и предполагая  $R \gg 1$ , получим для интеграла по полуокружности выражение

$$I = \frac{1}{R} \int_0^\pi ie^{-i\theta} d\theta, \quad (175)$$

которое обращается в нуль при  $R \rightarrow \infty$ , вследствие чего исходный интеграл (171) равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 2\pi i(1/2i) = \pi. \quad (176)$$

Еще один распространенный тип интегралов имеет вид

$$I = \int_0^{2\pi} f(\sin \theta, \cos \theta) d\theta. \quad (177)$$

Используя вновь уравнение (174), произведем замену

$$d\theta = -idz/z \quad (178)$$

и проинтегрируем вдоль окружности с радиусом  $R = 1$ . Интеграл (177) равен помноженной на  $2\pi i$  сумме вычетов  $a_{-1}$  внутри окруж-

ности единичного круга. Эти вычеты можно вычислить, используя экспоненциальные представления для синуса и косинуса

$$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} = \frac{z - z^{-1}}{2i}, \quad (179)$$

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} = \frac{z + z^{-1}}{2}. \quad (180)$$

## 14. ТЕОРИЯ ГРУПП

Группой называется множество элементов, для которого определена операция умножения и которое обладает следующими свойствами:

1. Множество является замкнутым, т. е. произведение двух любых элементов группы также принадлежит группе,  $ab = c$ .
2. Операция умножения обладает свойством ассоциативности:  $a(bc) = (ab)c$ .
3. Группа содержит единичный элемент  $I$  такой, что для всех элементов  $a$  имеет место  $aI = Ia = a$ .
4. Каждому элементу  $a$  группы соответствует обратный ему элемент  $a^{-1}$  такой, для которого  $aa^{-1} = a^{-1}a = I$ .

Абелевы (или коммутативные) группы отличаются тем, что для них операция умножения обладает коммутативностью,  $ab = ba$  для всех элементов группы. Примером служит множество из четырех элементов  $(1, -1, i, -i)$ , где 1 соответствует единичному элементу,  $-1$  — ее обратному элементу, а элемент  $-i$  является обратным по отношению к  $i$ . Эта группа циклическая (обозначается  $C_4$ ), а ее генератором служит элемент  $i$ , характеризующийся тем, что

$$i^2 = -1, \quad i^3 = -i, \quad i^4 = 1. \quad (181)$$

Циклическая группа из  $n$  элементов с генератором  $g$ , причем  $g^n = I$ , обозначается через  $C_n$ . Для циклической группы четвертого порядка таблица умножения элементов имеет вид

	1	-1	$i$	$-i$
1	1	-1	$i$	$-i$
-1	-1	1	$-i$	$i$
$i$	$i$	$-i$	-1	1
$-i$	$-i$	$i$	1	-1

Каждый из элементов группы должен один (и только один) раз входить в состав каждой строки и каждого столбца таблицы.

Подгруппой называется набор элементов более обширной группы, которые образуют собственную группу более низкого порядка. Например, элементы 1 и  $-1$  описанной выше циклической группы  $C_4$  образуют подгруппу.

Два элемента  $a$  и  $c$  принадлежат одному классу, если они связаны преобразованием подобия

$$a b a^{-1} = c, \quad (182)$$

и все возможные преобразования подобия разделяют элементы групп на подмножества, называемые классами.

Представлением группы называется множество матриц, удовлетворяющих таблице умножения группы. Неприводимым представлением называют такое множество матриц  $M_j$ , которое удовлетворяет таблице умножения, однако входящим в него матрицам нельзя одновременно всем понизить порядок одним и тем же преобразованием подобия  $U M_j U^{-1}$ , т. е.

$$U \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \\ m & n & o & p \end{pmatrix} U^{-1} = \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 \\ C & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & F \\ 0 & 0 & G & H \end{pmatrix}. \quad (183)$$

Каждая группа порядка  $h$  имеет определенное число неприводимых представлений, образованных матрицами  $n_i \times n_i$ , которые удовлетворяют соотношению

$$\sum n_i^2 = h, \quad (184)$$

где суммирование осуществляется по числу классов. Одномерными представлениями обладают только абелевы группы, все элементы которых коммутируют друг с другом.

Описанные выше свойства групп можно проиллюстрировать на примере свойств симметрии равностороннего треугольника. Такой треугольник имеет шесть элементов симметрии ( $h = 6$ ), а именно: преобразование тождественности  $I$ , вращения на углы  $120^\circ$  и  $240^\circ$  ( $R^{120}$  и  $R^{240}$ ) и три плоскости отражения  $\sigma_i$ , перпендикулярные плоскости треугольника (рис. 27.6). Операции отражения не коммутируют с вращениями. Все элементы можно разделить на три класса:

класс 1:  $I$ ,

класс 2:  $R^{120}, R^{240}$ ,

класс 3:  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ,

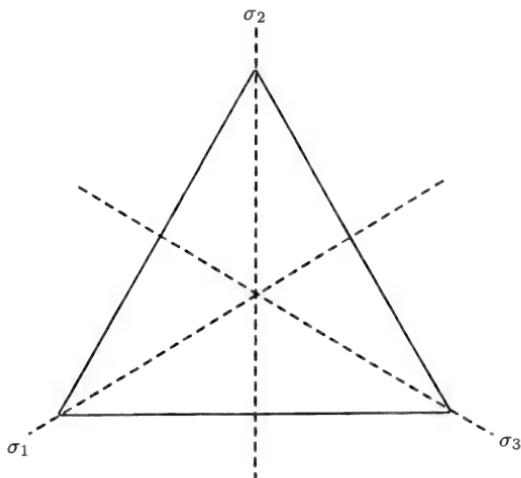


Рис. 27.6. Три плоскости симметрии ( $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и  $\sigma_3$ ) равностороннего треугольника.

которые могут быть разбиты на четыре подгруппы:

- подгруппа 1 :  $I, \sigma_1$ ,
- подгруппа 2 :  $I, \sigma_2$ ,
- подгруппа 3 :  $I, \sigma_3$ ,
- подгруппа 4 :  $I, R^{120}, R^{240}$ .

При этом имеется два одномерных и одно двумерное представления, вследствие чего (184) принимает вид

$$1^2 + 1^2 + 2^2 = 6. \quad (185)$$

Теория групп играет важную роль в кристаллографии. В табл. 27.3 приведены 11 собственных точечных групп, соответствующих семи кристаллографическим системам-сингониям, а также перечислены 10 производных групп (так называемые коммутанты) и 11 инверсных точечных групп, связанных с ними. Большая часть собственных точечных групп принадлежит либо к циклическим группам  $C_n$  (с осью симметрии  $n$ -го порядка), либо к диэдрическим группам  $D_n$  (с осью симметрии  $n$ -го порядка плюс перпендикулярной к ней осью вращения 2-го порядка). Кубическая система имеет тетраэдрическую ( $O$ ) и октаэдрическую собственные точечные группы. Производная точечная группа добавляет к соответствующей собственной

**Таблица 27.3.** Связь 10 производных точечных групп и 11 точечных групп инверсии, соответствующих 11 собственным точечным группам семи кристаллографических систем. Некоторые из производных групп получены операцией прямого перемножения, обозначаемой  $\otimes$ , другие — добавлением элементов симметрии, указанных в скобках после обозначения подгруппы. Для обозначения точечных групп использованы как символы Шенфлиса, так и международные обозначения (в квадратных скобках). Во втором столбце указаны связи между параметрами решетки и углами различных кристаллографических систем. Кроме этого, в литературе используются обозначения:  $C_3 = C_{1h}$ ,  $C_i = S_2$ ,  $C_{3i} = S_6$ ,  $D_2 = V$ ,  $D_{2d} = D_{2v} = V_d$ ,  $D_{2h} = V_h$ ,  $D_{3d} = D_{3v}$ , кубический = изометрический и т. д.

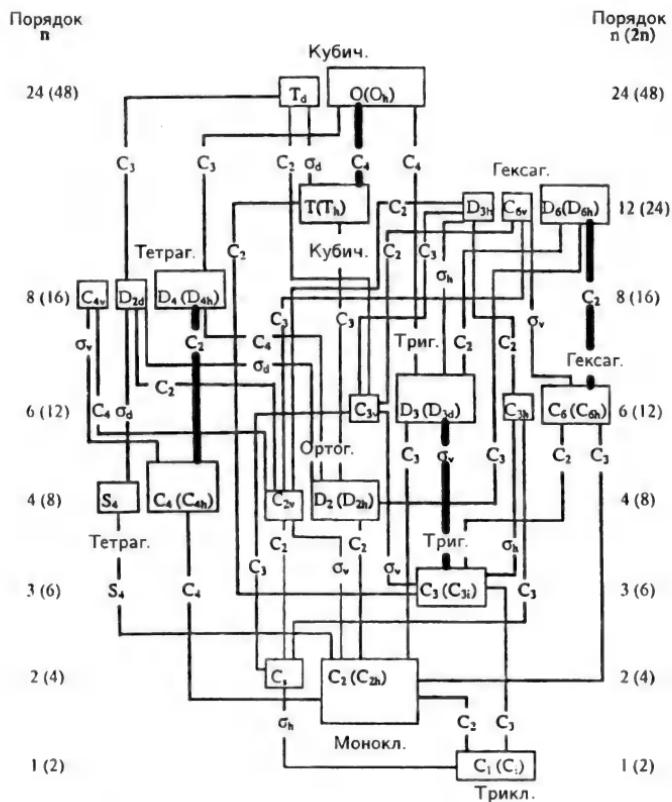
Кристалло-графическая система	Постоянные решетки и углы	Собственная точечная группа	Порядок ( $n$ )	Производная точечная группа (порядка $n$ )	Точечная группа инверсии (порядка $2n$ )
Триклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$C_1[1]$	1		$C_1 \otimes i = C_i[1]$
Моноклинная	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	$C_2[2]$	2	$C_1 \otimes \sigma_h = C_s[m]$	$C_2 \otimes i = C_{2h}[2/m]$
Орторомбическая	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$D_2[222]$	4	$C_2 \otimes \sigma_v = C_{2v}[2mm]$	$D_2 \otimes i = D_{2h}[2/mmm]$
Тригональная	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$	$C_3[3]$ $D_3[32]$	3 6	$C_3(+\sigma_v) = C_{3v}[3m]$	$C_3 \otimes i = C_{3h}[3]$ $D_3 \otimes i = D_{3d}[3m]$
Тетрагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$C_4[4]$ $D_4[422]$	4 8	$C_2(+S_4) = S_4[4]$ $C_4(+\sigma_v) = C_{4v}[4mm]$ $D_2(+\sigma_d) = D_{2d}[42m]$	$C_4 \otimes i = C_{4h}[4/m]$ $D_4 \otimes i = D_{4h}[4/mmm]$
Гексагональная	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$C_6[6]$ $D_6[622]$	6 12	$C_3(+\sigma_h) = C_{3h}[6]$ $C_6(+\sigma_v) = C_{6v}[6mm]$ $D_3 \otimes C_s = D_{3h}[6m2]$	$C_6 \otimes i = C_{6h}[6/m]$ $D_6 \otimes i = D_{6h}[6/mmm]$
Кубическая (изометрическая)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$T[23]$ $O[432]$	12 24	$T(+\sigma_d) = T_d[43m]$	$T \otimes i = T_h[m3]$ $O \otimes i = O_h[m3m]$

группе горизонтальную ( $\sigma_h$ ), вертикальную ( $\sigma_v$ ) и диагональную ( $\sigma_d$ ) плоскости отражения. Использование операции инверсии по отношению к собственной или производной точечной группе создает одну из одиннадцати групп инверсии, перечисленных в крайнем правом столбце табл. 27.3. На рис. 27.7 показано также, каким образом различные группы генерируют друг друга при операциях, связанных с понижением симметрии.

При добавлении операций симметрии с преобразованиями параллельного переноса к 32 точечным группам мы получаем 230 пространственных кристаллографических групп, среди которых можно выделить 73 пространственные группы, называемые полупрямыми (или симморфическими) произведениями. Такие группы являются производными точечных групп и возникают при добавлении к последним операций симметрии типа чистого переноса. Остальные 157 пространственных групп содержат помимо трансляций плоскости скольжения и винтовые оси. В соответствии со строгой классификацией теории групп фактически мы имеем лишь 219 неизоморфных пространственных групп, поскольку 11 из них представляют собой зеркальные отражения других.

Помимо 32 кристаллографических точечных групп, описывающих кристаллические решетки, существуют также некоторые дополнительные точечные группы, соответствующие симметрии молекул. Например, кристаллическая решетка не может обладать осьми вращения 5-го порядка (которые соответствуют повороту на  $72^\circ$ ), однако молекула ферроцена  $(C_5H_5)_2Fe$  включает в себя две пятиугольные циклические структуры  $C_5H_5$ , расположенные друг над другом, между которыми находится атом железа. Эти структуры могут вращаться вокруг общей оси, в результате чего возникает операция несобственной симметрии вращения 5-го порядка  $S_5$ . Молекулам такого типа соответствует точечная группа  $D_{5d}$ .

Все рассматриваемые выше группы относятся к конечным группам, однако существуют и бесконечные группы, примером которых может служить множество всех  $3 \times 3$ -матриц вращения, образующих ортогональную группу третьего порядка, обозначаемую символом  $O(3)$ . Множество всех унитарных  $n \times n$ -матриц образует группу  $U(n)$ . Особый интерес представляет множество всех унитарных  $2 \times 2$ -матриц с детерминантом, равным  $+1$  которые образуют специальную, или унимодулярную группу  $SU(2)$ , а также множество всех унитарных  $3 \times 3$ -матриц с детерминантом  $+1$ , образующих специальную унитарную группу  $SU(3)$ . На использовании этой группы симметрии основан предложенный Гелл-Маном «восьм-



**Рис. 27.7.** Соотношения, возникающие при понижении порядка симметрии, между 32 кристаллографическими точечными группами в сингониях (кристаллографических системах). В вытянутых прямоугольниках приводятся обозначения собственных точечных групп инверсии  $n$ -го порядка (цифры в скобках слева) и соответствующих точечных групп инверсии (в скобках в правой части прямоугольника). Обозначения производных точечных групп указаны в квадратиках слева от соответствующих им присоединенных собственных точечных групп. Порядок собственных и производных групп указывается по шкале слева и справа от рисунка. Линии обычной толщины связывают производные группы (коммутанты) с указанными ниже их подгруппами. Прямоугольники с обозначениями групп одинаковой кристаллографической системы расположены друг под другом и соединены вертикальными жирными линиями. Указаны также элементы симметрии, которые необходимо добавить к подгруппам, чтобы преобразовать их в группы, расположенные над ними. Рисунок следует сопоставить с данными табл. 27.3. (Из книги: *Misra S. et al., Applied Magnetic Resonance, 11, 1996, 29.*)

ричный путь» классификации элементарных частиц с тремя кварками  $u, d, s$  (верхний, нижний, странный), приводящей к барионным состояниям на рис. 26.5. Другие схемы этого типа (рис. 26.7 и 26.8) основаны на использовании для классификации частиц группы  $SU(4)$ , возникающей при добавлении четвертого, «очарованного» кварка  $c$ .

В заключение следует упомянуть алгебры Ли, элементы  $\tau_i$  которых обладают следующим свойством: коммутатор двух любых элементов

$$[\tau_i, \tau_j] = \tau_i \tau_j - \tau_j \tau_i \quad (186)$$

является линейной комбинацией других элементов, т. е. имеет вид

$$[\tau_i, \tau_j] = -i \sum C_{ij}^k \tau_k, \quad (187)$$

где суммирование ведется по  $k$  элементам, а действительные константы  $C_{ij}^k$  (которые и определяют данную алгебру) называются структурными константами. Алгебрам Ли соответствуют группы Ли.

## 15. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Метод Монте-Карло представляет собой численный метод, основанный на использовании случайных переменных. Метод довольно сложно изложить в общем виде, поэтому мы рассмотрим конкретный пример вычисления методом Монте-Карло определенного интеграла

$$I = \int_a^b F(x) dx, \quad (188)$$

где подынтегральная функция  $F(x)$  удовлетворяет неравенству

$$0 \leq F(x) \leq M \quad (189)$$

для значений  $x$  в диапазоне  $0 \leq a \leq x \leq b$ .

Обычно генераторы случайных чисел дают набор чисел на отрезке  $0 < x_i < 1$ , и вычисление интеграла начинается с построения двух последовательностей из  $N$  случайных чисел

$$\begin{aligned} x'_1, x'_2, x'_3, \dots, x'_N, \\ y'_1, y'_2, y'_3, \dots, y'_N. \end{aligned} \quad (190)$$

Преобразования

$$\begin{aligned} x_i &= a + x'_i(b - a), \\ y_i &= y'_i M \end{aligned} \quad (191)$$

переводят первоначальные наборы (190) в пары случайных чисел  $(x_i, y_i)$ , соответствующие областям изменения переменных  $x$  и  $y$  в рассматриваемой задаче. Далее для каждого значения  $x_i$  значение функции  $f(x_i)$  сравнивается с соответствующим числом  $y_i$ , после чего подсчитывается количество  $n$  случаев, для которых  $f(x_i) < y_i$ . Случай  $f(x_i) = y_i$  засчитывается как  $1/2$ . Интеграл (188) имеет величину

$$I = \frac{nM}{N}(b - a). \quad (192)$$

Этот метод случайных чисел позволяет найти выражение (188), которое в исходном виде не содержит никаких параметров, носящих случайный характер.

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА: ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

---

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей главе мы рассмотрели ряд различных методов математической физики, включая интегральные уравнения и способы их решения. Данная глава более однородна и имеет дело только с различными типами дифференциальных уравнений и некоторыми специальными функциями, широко применяемыми в физике. Многие из этих функций (например, функции Бесселя и Лежандра) являются решениями дифференциальных уравнений второго порядка. Другие специальные функции (такие как гамма-функция) не связаны с решением дифференциальных уравнений или вводятся в качестве вспомогательных средств (например, функции Грина) для их решения. Мы рассмотрим типы дифференциальных уравнений и особенности их решений, а также приведем табулированные значения многих специальных функций действительных и мнимых аргументов. В некоторых случаях приводятся асимптотические выражения, отвечающие бесконечно большим или бесконечно малым значениям аргументов.

## 2. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Если дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (1)$$

может быть записано в форме

$$P(x, y)dx + Q(x, y)dy = 0 \quad (2)$$

[где  $f(x, y) = -P(x, y)/Q(x, y)$ ] и если существует функция  $\phi(x, y)$ , такая, что это уравнение может быть записано в виде дифференциала  $d\phi$

$$d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} dx + \frac{\partial \phi}{\partial y} dy = 0 \quad (3)$$

(где  $P = \partial\phi/\partial x$  и  $Q = \partial\phi/\partial y$ ), то уравнение (1) называется уравнением в полных дифференциалах, а его решение имеет вид

$$\phi(x, y) = \text{const.} \quad (4)$$

Особо важную роль уравнения в полных дифференциалах играют в термодинамике.

Если функция  $f(x, y)$  в уравнении (1) может быть представлена в виде  $-p(x)y(x) + q(x)$ , то мы получаем дифференциальное уравнение первого порядка в наиболее общей форме:

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y = q(x). \quad (5)$$

Уравнения этого типа подразделяются на однородные [если  $q(x) = 0$ ] и неоднородные [если  $q(x) \neq 0$ ]. Если удается найти интегрирующий множитель  $\alpha(x)$ , обладающий свойством

$$\frac{d}{dx}[\alpha(x)y] = \alpha(x)q(x), \quad (6)$$

то уравнение интегрируется непосредственно и дает решение. Интегрирующий множитель должен удовлетворять условию

$$\frac{d}{dx}[\alpha(x)] = \alpha(x)p(x), \quad (7)$$

интегрируя которое, можно получить точное решение для  $\alpha(x)$

$$\alpha(x) = \alpha(x_0) \exp \left[ \int p(x)dx \right] \quad (8)$$

в виде экспоненты, показателем которой служит интеграл  $p(x)$  по  $x$ .

### 3. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

В табл. 28.1 приведены некоторые однородные дифференциальные уравнения второго порядка и их характерные особенности, а в табл. 28.2 — некоторые из решений в виде полиномов. Эти уравнения называются однородными, поскольку каждый член представляет собой произведение постоянной или некоторой функции  $f(x)$  на

$u''$ ,  $u'$  или  $u$ . Существует три общих вида записи каждого из уравнений. Мы проиллюстрируем их для случая уравнения Бесселя

$$x^2 u'' + x u' + [a^2 x^2 - n^2] u = 0 \quad \text{обычная запись,} \quad (9a)$$

$$x u'' + u' + [a^2 x - (n^2/x)] u = 0 \quad \begin{aligned} &\text{самосопряженное} \\ &\text{уравнение,} \end{aligned} \quad (9b)$$

$$u'' + x^{-1} u' + [a^2 - (n^2/x^2)] u = 0 \quad \begin{aligned} &\text{уравнение} \\ &\text{с выделенными} \\ &\text{особенностями.} \end{aligned} \quad (9b)$$

Обычная запись уравнения не имеет специального обоснования, а лишь представляет собой стандартный вид данного уравнения. Самосопряженное уравнение в общем случае может быть записано в виде

$$p u'' + p' u' + q u + \lambda w u = 0 \quad (10)$$

или

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x) u(x) + \lambda w(x) u(x) = 0. \quad (11)$$

Функции  $p(x)$  и  $q(x)$ , собственное значение  $\lambda$  и плотность или весовая функция  $w(x)$  приведены в табл. 28.1.

Дифференциальное уравнение (10) имеет два независимых решения для каждого собственного значения

$$u(x) = a u_1(x) + b u_2(x), \quad (12)$$

причем одно из решений может быть в общем случае найдено методом Фробениуса, когда решение ищется в виде степенного ряда

$$u(x) = x^k (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots). \quad (13)$$

Этот ряд следует подставить в дифференциальное уравнение (10) и приравнять нулю коэффициенты при каждой из степеней  $x$ , причем низшая степень по  $x$  позволяет найти значение  $k$  (в некоторых случаях — два возможных значения  $k$ ). Оставшиеся соотношения дают рекуррентные формулы для коэффициентов  $a_m$  уравнения (13). Например, для уравнения Бесселя можно получить формулу

$$a_{2m} = \frac{(-1)^m n! a_0}{2^{2m} m! (m+n)!}, \quad (14)$$

где  $n$  — целое число, которое входит в член  $q(x) = -n^2/x$  исходного дифференциального уравнения в табл. 28.1. Иногда решение в виде степенного ряда содержит бесконечное число членов (как в случае уравнения Бесселя), а иногда оно обрывается на каком-то

**Таблица 28.1.** Характеристики основных дифференциальных уравнений второго порядка, встречающихся при решении физических задач. Функции Бесселя разлагаются в бесконечный ряд, остальные функции представляют собой полиномы. Звездочкой (\*) в седьмом столбце отмечены особые точки. В первом столбце приведены названия и стандартная форма записи уравнений, во втором — область изменения переменной, в столбцах 3–6, соответственно, представлены вид функций  $p(x)$  и  $q(x)$ , собственные значения и весовые функции  $w(x)$  для самосопряженных уравнений вида  $p(x)u'' + p'(x)u' + q(x)u + \lambda u(x)u(x) = 0$ .

Название и вид уравнения	Область изменения переменной $x$	Самосопряженное уравнение		Собственные значения $\lambda$	Весовая функция $w(x)$	Особые точки	Четность
		$p(x)$	$q(x)$				
Уравнение Лежандра $(1-x^2)u'' - 2xu' + \ell(\ell+1)u = 0$	$-1 \leq x \leq 1$	$1-x^2$	0	$\ell(\ell+1)$	1	$-1, 1, \infty$	да
Присоединенное уравнение Лежандра с дополнительным членом $-m^2u/(1-x^2)$	$-1 \leq x \leq 1$	$1-x^2$	$-\frac{m^2}{1-x^2}$	$\ell(\ell+1)$	1	$-1, 1, \infty$	да
Уравнение Бесселя $x^2u'' + xu' + (x^2a^2 - n^2)u = 0$	$0 \leq x \leq \infty$	$x$	$-\frac{n^2}{x}$	$a^2$	$x$	$0, \infty^*$	да
Уравнение Лагерра $xu'' + (1-x)u' + nu = 0$	$0 \leq x \leq \infty$	$xe^{-x}$	0	$n$	$e^{-x}$	$0, \infty^*$	нет
Присоединенное уравнение Лагерра с дополнительным членом $+ku'$	$0 \leq x \leq \infty$	$x^{k+1}e^{-x}$	0	$n-k$	$x^k e^{-x}$	$0, \infty^*$	нет
Уравнение Эрмита $u'' - 2xu' + 2nu = 0$	$-\infty \leq x \leq \infty$	$e^{-x^2}$	0	$2n$	$e^{-x^2}$	$\infty^*$	да

**Таблица 28.2.** Характеристики различных типов дифференциальных уравнений (звездочкой \* отмечены особые точки).

Полиномы	Особые точки	Вид дифференциального уравнения	Определение
Лежандра $P_n(z)$	$-1 \leq z \leq 1$	$-1, +1, \infty$ $(1 - z^2)F'' - 2zF' + n(n + 1)F = 0$	$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dz^n} (z^2 - 1)^n$
Эрмита $H_n(z)$	$-\infty \leq z \leq \infty$	$\infty^*$ $F'' - 2zF' + 2nF = 0$	$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z^2})$
Лагерра $L_n(z)$	$0 \leq z \leq \infty$	$0, \infty^*$ $zF'' + (1 - z)F' + nF = 0$	$L_n(z) = \frac{e^z}{n!} \frac{d^n}{dz^n} (z^n e^{-z})$
Чебышева первого рода $T_n(z)$	$-1 \leq z \leq 1$	$-1, +1, \infty$ $(1 - z^2)F'' - zF' + n^2F = 0$	$T_n(z) = \frac{(-1)^n \pi^{1/2} (1 - z^2)^{1/2}}{2n(n - \frac{1}{2})!} \frac{d^n}{dz^n} (1 - z^2)^{n-1/2}$
Чебышева второго рода $U_n(z)$	$-1 \leq z \leq 1$	$-1, +1, \infty$ $(1 - z^2)F'' - 3zF' + n(n + 2)F = 0$	$U_n(z) = \frac{(-1)^n (n + 1) \pi^{1/2}}{2^{n+1} (n + \frac{1}{2})! (1 - z^2)^{1/2}} \frac{d^n}{dz^n} (1 - z^2)^{n+1/2}$

Таблица 28.2. Продолжение

Производящая функция $g(z, t)$	Рекуррентные формулы	Соотношения ортогональности и нормировки
$(1 - 2zt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(z)t^n$	$\left\{ \begin{array}{l} (2n+1)zP_n = (n+1)P_{n+1} + nP_{n-1} \\ P'_{n+1} + P'_{n-1} = 2zP'_n + P_n \\ P'_{n+1} - P'_{n-1} = (2n+1)P_n \end{array} \right\}$	$\int_{-1}^1 P_n(z)P_m(z)dz = \frac{2\delta_{nm}}{2n+1}$
$e^{-t^2+2tz} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z) \frac{t^n}{n!}$	$\left\{ \begin{array}{l} H_{n+1} = 2zH_n - 2nH_{n-1} \\ H'_n = 2nH_{n-1} \end{array} \right\}$	$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z)H_m(z)e^{-z^2}dz = 2^n \pi^{1/2} n! \delta_{nm}$
$\frac{e^{-tz/(1-t)}}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(z)t^n$	$\left\{ \begin{array}{l} (n+1)L_{n+1} =  2n+1-z L_n - nL_{n-1} \\ zL'_n = nL_n - nL_{n-1} \end{array} \right\}$	$\int_0^{\infty} L_n(z)L_m(z)e^{-z}dz = \delta_{nm}$
$\frac{1-t^2}{1-2zt+t^2} = T_0(z) + 2\sum_{n=0}^{\infty} T_n(z)t^n$	$\left\{ \begin{array}{l} T_{n+1} + T_{n-1} = 2zT_n \\ (1-z^2)T'_n = -nzT_n + nT_{n-1} \end{array} \right\}$	$\int_{-1}^1 \frac{T_n(z)T_m(z)}{(1-z^2)^{1/2}}dz = \begin{cases} \frac{1}{2}\pi\delta_{nm} & n > 0 \\ \pi\delta_{nm} & n = 0 \end{cases}$
$\frac{1}{1-2zt+t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(z)t^n$	$\left\{ \begin{array}{l} U_{n+l} + U_{n-1} = 2zU_n \\ (1-z^2)U_n = -nzU_n + (n+1)U_{n-1} \end{array} \right\}$	$\int_{-1}^1 U_n(z)U_m(z)(1-z^2)^{1/2}dz = \frac{\pi}{2}\delta_{nm}$

Таблица 28.2. Продолжение

Четность	Значения в особых точках	Присоединенный полином
$P_n(-z) = (-1)^n P_n(z)$	$\left\{ \begin{array}{l} P_n(1) = 1 \\ P_n(-1) = (-1)^{-n} \end{array} \right\}$	$P_n^m(z) = (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^m}{dz^m} P_n(z)$
$H_n(-z) = (-1)^n H_n(z)$	$\left\{ \begin{array}{l} H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} \\ H_{2n+1}(0) = 0 \end{array} \right\}$	Отсутствует
Четность отсутствует ( $z$ не может быть $< 0$ )	$L_n(0) = 1$	$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{d^m}{dz^m} L_{n+m}(z)$
$T_n(-z) = (-1)^n T_n(z)$	$\left\{ \begin{array}{l} T_n(1) = 1 \\ T_n(-1) = (-1)^n \\ T_{2n}(0) = (-1)^n \\ T_{2n+1}(0) = 0 \end{array} \right\}$	Отсутствует
$U_n(-z) = (-1)^n U_n(z)$	$\left\{ \begin{array}{l} U_n(1) = n + 1 \\ U_n(-1) = (-1)^n (n + 1) \\ U_{2n}(0) = (-1)^n \\ U_{2n+1}(0) = 0 \end{array} \right\}$	Отсутствует

члене (как в случае уравнения Лежандра). Свойства некоторых полиномиальных решений указаны в табл. 28.2, а низшие члены этих полиномов приведены в табл. 28.3.

Еще одна особенность решений дифференциальных уравнений, заслуживающая упоминания, связана с четностью или отсутствием четности у их решений. Некоторые из них (например, решения уравнений Бесселя и Лежандра) содержат только нечетные степени  $x$ , а другие — только четные степени. Это означает, что таким решениям можно приписать определенную четность,

$$Pu(x) = u(-x) = \pm u(x). \quad (15)$$

Четность частных решений  $u_n(x)$  такого типа чередуется, т. е. меняется при переходе от четных значений  $n$  к нечетным. Другие решения (например, полиномы Лагерра) содержат как четные, так и нечетные степени  $x$ , вследствие чего этим решениям нельзя приписать определенной четности. Из данных табл. 28.3 видно, что полиномы  $P_n$ ,  $H_n$ ,  $T_n$  и  $U_n$  обладают чередующейся четностью, тогда как полиномам Лагерра определенную четность нельзя приписать, поскольку каждый полином  $L_n$  содержит как четные, так и нечетные степени  $x$ .

Найти второе независимое решение  $u_2(x)$  уравнения (12) довольно сложно. Так как решения должны быть ортогональны, вронсийан системы  $W$  не может равняться нулю, т. е.

$$W = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 \\ u'_1 & u'_2 \end{vmatrix} = u_1 u'_2 - u_2 u'_1 \neq 0. \quad (16)$$

Иногда два полученных таким образом решения относятся к совершенно разным практическим задачам. Например, функции Бесселя  $J_n(x)$  быстро сходятся в начале координат при  $x \rightarrow 0$ , тогда как второе решение, называемое функцией Неймана  $N_n(x)$ , в этой точке расходится.

Решения  $u_i(x)$  дифференциального уравнения второго порядка для различных собственных значений  $\lambda$  линейно независимы друг от друга и иногда образуют ортогональную последовательность, которую можно нормировать и преобразовать в последовательность функций  $\phi_n(x)$ , удовлетворяющих условию ортонормированности

$$\int \phi_i^*(x) \phi_j(x) w(x) dx = \delta_{ij}, \quad (17)$$

где  $w(x)$  — весовые функции уравнений (10) и (11), а интегрирование осуществляется по области изменений переменной  $x$ . Такие ортонормированные решения называются собственными функциями.

Таблица 28.3. Полиномы низших порядков (табл 28.2.).

Полиномы Лежандра

$$P_0(z) = 1$$

$$P_1(z) = z = \cos \theta$$

$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z) = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$P_4(z) = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3) = \frac{1}{8}(35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3)$$

Присоединенные полиномы Лежандра  $P_n^m(z)$ , где  $m \leq n$  и  $P_n^0(z) \equiv P_n(z)$ 

$$P_0^0(z) = z = \cos \theta$$

$$P_0^1(z) = (1 - z^2)^{1/2} = \sin \theta$$

$$P_2^0(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_2^1(z) = 3z(1 - z^2)^{1/2} = 3 \cos \theta \sin \theta$$

$$P_2^2(z) = 3(1 - z^2) = 3 \sin^2 \theta$$

$$P_3^0(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z) = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$P_3^1(z) = \frac{3}{2}(5z^2 - 1)(1 - z^2)^{1/2} = \frac{3}{2}(5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta$$

$$P_3^2(z) = 15z(1 - z^2) = 15 \cos \theta \sin^2 \theta$$

$$P_3^3(z) = 15(1 - z^2)^{3/2} = 15 \sin^3 \theta$$

Полиномы Эрмита

$$H_0(z) = 1$$

$$H_1(z) = 2z$$

$$H_2(z) = 2(2z^2 - 1)$$

$$H_3(z) = 4(2z^3 - 3z)$$

$$H_4(z) = 4(4z^4 - 12z^2 + 3)$$

Полиномы Лагерра

$$L_0(z) = 1$$

$$L_1(z) = -z + 1$$

$$L_2(z) = (z^2 - 4z + 2)/2!$$

$$L_3(z) = (-z^3 + 9z^2 - 18z + 6)/3!$$

$$L_4(z) = (z^4 - 16z^3 + 72z^2 - 96z + 24)/4!$$

Полиномы Чебышева первого рода

$$T_0(z) = 1$$

$$T_1(z) = z$$

$$T_2(z) = 2z^2 - 1$$

$$T_3(z) = 4z^3 - 3z$$

$$T_4(z) = 8z^4 - 8z^2 + 1$$

Полиномы Чебышева второго рода

$$U_0(z) = 1$$

$$U_1(z) = 2z$$

$$U_2(z) = 4z^2 - 1$$

$$U_3(z) = 8z^3 - 4z$$

$$U_4(z) = 16z^4 - 12z^2 + 1$$

Если решения линейно независимы, но не ортогональны, то для их преобразования в ортонормированные функции  $\phi_n$  можно использовать процедуру Грама — Шмидта, которая заключается в следующем. Отберем среди линейно независимых функций  $u_0, u_1, u_2, \dots$  в качестве первой ненормированной собственной функции  $u_0$ , перепишем ее в виде  $\phi_0(x) = N_0 u_0$  и нормируем следующим образом:

$$\phi_0(x) = \frac{u_0(x)}{\left(\int u_0^2(x)w(x)dx\right)^{1/2}}. \quad (18)$$

Функция  $\phi_0(x)$  становится первой в искомом наборе ортонормированных собственных функций. Вторую функцию  $\phi_1(x)$  можно определить с помощью выражения

$$\phi_1(x) = N_1[u_1(x) + a\phi_0]. \quad (19)$$

Параметр  $a$  можно найти из условия ортогональности  $\phi_1$  и  $\phi_0$ . Нормировочный множитель  $N_1$  находят аналогично (18). Следующая собственная функция  $\phi_2$  записывается в виде

$$\phi_2(x) = N_2[u_2(x) + b\phi_1 + c\phi_0], \quad (20)$$

где величины  $b$  и  $c$  определяют из условия ортогональности  $\phi_2$  функциям  $\phi_1$  и  $\phi_0$ . Процесс продолжается до тех пор, пока все решения  $u_i$  не будут преобразованы в ортогональные собственные функции  $\phi_i$ .

Собственные функции  $\phi_n$ , отвечающие различным собственным значениям  $\lambda_n$ , образуют полную систему в том смысле, что любая регулярная функция  $F(x)$  в некотором диапазоне значений  $x$  может быть представлена в виде ряда

$$F(x) = \sum a_n \phi_n(x) \quad (21)$$

с требуемой точностью. Это свойство системы функций называется полнотой.

## 4. УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА И ГЕЛЬМГОЛЬЦА

Уравнение Лапласа

$$\nabla^2 \Psi = 0 \quad (22)$$

является, возможно, наиболее важным уравнением математической физики. В частности, при решении уравнения Шредингера с радиальным потенциалом угловая часть волновой функции подчиняется уравнению Лапласа.

Рассмотрим уравнение Лапласа в декартовых координатах, когда переменные легко разделяются и уравнение преобразует вид

$$\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = 0. \quad (23)$$

Решение можно записать в виде произведения функций

$$\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z), \quad (24)$$

каждая из которых представляет собой либо гармонику, либо затухающую или расходящуюся функцию:

$$\begin{aligned} \text{гармоническое решение: } & \sin kx, e^{ikx}, e^{-ikx} \\ \text{затухающие — расходящиеся решения: } & \sinh \kappa x, \cosh \kappa x, e^{\kappa x}, e^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (25)$$

В соответствии с природой уравнения одно из решений оказывается гармоническим, другое — затухающим или неограниченно растущим, а третье любого типа. Другими словами, решение может иметь вид

$$\Psi(x, y, z) = \sin k_x x \cdot \cos k_y y \cdot \sinh \kappa_z z; \quad (26)$$

подстановка его в уравнение Лапласа (23) дает

$$-k_x^2 - k_y^2 + \kappa_z^2 = 0. \quad (27)$$

Отсюда видно, что решение должно содержать хотя бы одно гармоническое и хотя бы одно затухающее или неограниченно растущее решение. Это утверждение справедливо в любой координатной системе, обеспечивающей разделение переменных в уравнении. Поэтому, например, оно не выполняется для волнового уравнения

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0, \quad (28)$$

которое при наличии гармонической зависимости от времени  $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)e^{i\omega t}$  переходит в уравнение Гельмгольца

$$\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = 0, \quad (29)$$

где  $k = \omega/c$  и все пространственные составляющие могут иметь гармонический характер. Однако остается требование, чтобы гармоническую зависимость имела по крайней мере одна из пространственных составляющих.

В цилиндрических координатах уравнение Лапласа с разделением переменных

$$\frac{1}{\rho R} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \Phi} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = 0, \quad (30)$$

где

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z). \quad (31)$$

Подставляя в (30) в качестве  $\Phi(\varphi)$  гармоническое решение, а в качестве  $Z(z)$  — затухающее или растущее решение, т. е. записывая  $\Psi(\rho, \varphi, z)$  в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)e^{im\varphi} \operatorname{sh} \kappa z, \quad (32)$$

мы приходим к уравнению Бесселя

$$\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) + (\kappa^2 \rho^2 - m^2)R = 0, \quad (33)$$

решением которого являются функции Бесселя  $R(\rho) = J_m(\kappa\rho)$  гармонического характера. Выбрав оба решения  $\Phi(\varphi)$  и  $Z(z)$  в виде гармонических функций, мы пришли бы к модифицированному уравнению Бесселя

$$\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) - (\kappa^2 \rho^2 + m^2)R = 0 \quad (34)$$

с решениями затухающего и растущего типа, такими как  $R(\rho) = K_n(\kappa\rho)$ , которые называются модифицированными функциями Бесселя. Более детально мы рассмотрим обыкновенные и модифицированные функции Бесселя в следующем разделе.

В сферических координатах уравнение Гельмгольца (29) допускает разделение переменных:

$$\frac{1}{Rr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + k^2 = 0, \quad (35)$$

где

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (36)$$

Решение в угловых переменных представляет собой сферические гармоники  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ , которые будут детально рассмотрены ниже в разд. 7. Полное решение имеет вид

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{LM}(\theta, \varphi), \quad (37)$$

откуда для радиальной части имеем

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + [k^2 r^2 - n(n+1)]R = 0, \quad (38)$$

где мы записали  $n(n+1)$  вместо  $L(L+1)$ . Применяя замену переменных

$$R(r) = P(kr)/(kr)^{1/2}, \quad (39)$$

можно преобразовать (38) в уравнение Бесселя полуцелого порядка:

$$r^2 \frac{d^2 P}{dr^2} + r \frac{dP}{dr} + [k^2 r^2 - (n + \frac{1}{2})^2]P = 0, \quad (40)$$

решением  $P(r)$  которого являются сферические функции Бесселя  $j_n(kr)$

$$j_n(kr) = (\pi/2kr)^{1/2} J_{n+\frac{1}{2}}(kr), \quad (41)$$

рассмотренные ниже. Три следующих раздела посвящены функциям Бесселя, полиномам Лежандра и сферическим гармоникам.

## 5. ФУНКЦИИ БЕССЕЛЯ

Уравнение Бесселя (33), которое можно переписать в виде

$$z^2 \frac{d^2 J_n(z)}{dz^2} + z \frac{dJ_n(z)}{dz} + (z^2 - n^2) J_n(z) = 0, \quad (42)$$

имеет решения, называемые функциями Бесселя  $J_n(z)$ , которые могут быть представлены в виде бесконечных рядов

$$J_n(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \left( \frac{(-1)^m}{m!(m+n)!} \right) \left( \frac{z}{2} \right)^{n+2m}. \quad (43)$$

Они имеют также интегральные представления для  $|\arg z| < \pi/2$

$$J_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\theta - z \sin \theta) d\theta \quad (44)$$

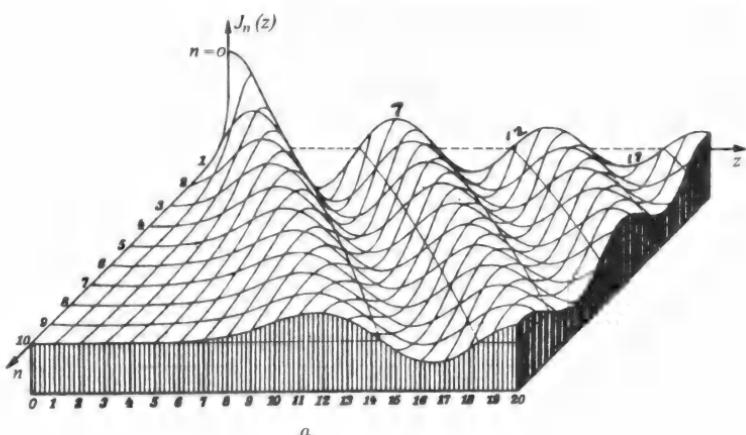
(с частным случаем

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iz \sin \theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos \theta} d\theta \quad (45)$$

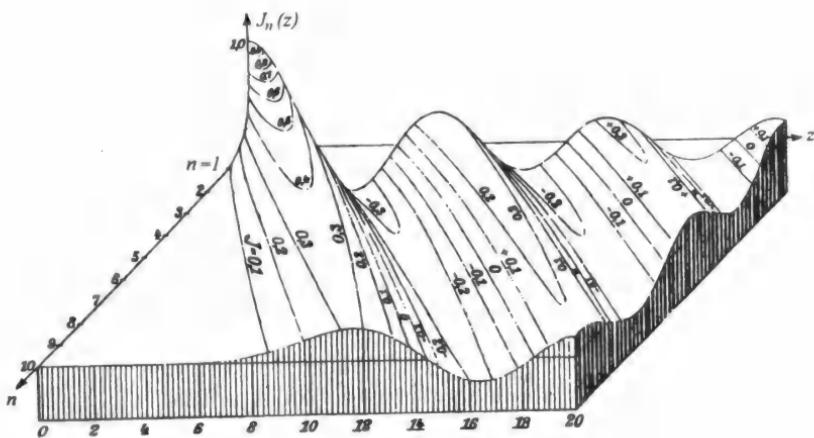
для  $n = 0$ ), представление через производящую функцию

$$e^{z(r^2-1)/2t} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_n(z) t^n \quad (46)$$

и некоторые другие представления. На рис. 28.1 показана зависимость функции Бесселя  $J_n(z)$  от порядка  $n$  и аргумента  $z$ , а в табл. 28.4 приведены корни функций Бесселя, т. е. значения аргумента  $z$ , при которых функции Бесселя  $J_n(z)$  и их производные  $J'_n(z) = dJ_n/dz$  равны нулю. В табл. 28.5 даны асимптотические выражения функций Бесселя при очень малых и очень больших значениях  $z$ .



a



б

Рис. 28.1. Зависимость функций Бесселя  $J_n(z)$  порядка  $n$  от действительных значений переменной  $z$ . *а* — профили функций, соответствующие постоянным  $n$  и  $z$ , а также значениям  $J_n(z) = 0$ ; *б* — профили, отвечающие постоянным значениям амплитуды. (Из книги: E. Jahnke, F. Emde, Tables of Functions, Dover, New York, 1945, p. 127a, 153b.)

**Таблица 28.4.** Корни функций Бесселя ( $J_n(z) = 0$ ) и их производных ( $J'_n(z) = 0$ ).

Корень	$J_0(z)$	$J_1(z)$	$J_2(z)$	$J_3(z)$
1	2,4048	3,8317	5,1356	6,3802
2	5,5201	7,0156	8,4172	9,7610
3	8,6537	10,1735	11,6198	13,0152
4	11,7915	13,3237	14,7960	16,2235
Корень	$J'_0(z)$	$J'(z)$	$J'_2(z)$	$J'_3(z)$
1	3,8317	1,8412	3,0542	4,2012
2	7,0156	5,3314	6,7061	8,0152
3	10,1735	8,5363	9,9695	11,3459

Функции Бесселя для положительных и отрицательных значений порядка  $n$  линейно независимы только для нецелочисленных  $n$ . При целочисленных значениях  $n$  функции с положительными и отрицательными значениями порядка связаны соотношением

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z). \quad (47)$$

Функции Бесселя при положительных  $n$  регулярны в окрестности начала координат ( $z \rightarrow 0$ ). Вторым линейно независимым решением уравнения Бесселя является функция Неймана

$$N_n(z) = \frac{J_n(z) \cos n\pi - J_{-n}(z)}{\sin n\pi}, \quad (48)$$

которая расходится в начале координат ( $z \rightarrow 0$ ). Линейная комбинация решений в виде функций  $J_n(z)$  и  $N_n(z)$  приводит к функциям Ганкеля первого рода  $H_n^{(1)}(z)$  и второго рода  $H_n^{(2)}(z)$ :

$$H_n^{(1)}(z) = J_n(z) + iN_n(z), \quad (49a)$$

$$H_n^{(2)}(z) = J_n(z) - iN_n(z). \quad (49b)$$

Четыре перечисленных типа функций (47) – (49б) связаны следующими рекуррентными соотношениями:

$$J_{n-1}(z) + J_{n+1}(z) = \frac{2n}{z} J_n(z), \quad (50a)$$

$$J_{n-1}(z) - J_{n+1}(z) = 2 \frac{dJ_n(z)}{dz}. \quad (50b)$$

Помимо этого функции Бесселя подчиняются условию ортогональности (для  $p \neq m$ )

$$\int_0^a J_n(\alpha_{nm} \rho/a) J_n(\alpha_{np} \rho/a) \rho d\rho = 0, \quad (51)$$

Таблица 28.5. Асимптотическое поведение различных функций Бесселя при малых и больших значениях аргумента.

Функция	Асимптотика при $z \ll 1$	Асимптотика при $z \gg 1$
$J_n(z)$	$\begin{cases} 1 - z^2/4 & n = 0 \\ z^n/2^n n! & n > 0 \end{cases}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \left[ z - \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} \right]$
$N_n(z)$	$\begin{cases} \frac{2}{\pi} (\ln z + \gamma = \ln 2) & n = 0 \\ \frac{-(n-1)!}{\pi} \left( \frac{2}{z} \right)^2 & n > 0 \end{cases}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin \left[ z - \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} \right]$
$H_n^{(1)}(z)$	$\begin{cases} 2i \ln z / \pi & n = 0 \\ \frac{-(n-1)!i}{\pi} \left( \frac{2}{z} \right)^n & n > 0 \end{cases}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp i \left[ z - \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} \right]$
$H_n^{(2)}(z)$	$\begin{cases} -2i \ln z / \pi & n = 0 \\ \frac{(n-1)!i}{\pi} \left( \frac{2}{z} \right)^n & n > 0 \end{cases}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp -i \left[ z - \left( \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} \right]$
$I_n(z)$	$\begin{cases} 1 + z^2/4 & n = 0 \\ z^n/2^n n! & n > 0 \end{cases}$	$\frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}}$
$K_n(z)$	$\begin{cases} -\ln z & n = 0 \\ \frac{1}{2^{n-1} (n-1)!} z^{-n} & n > 0 \end{cases}$	$\sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$
$j_n(z)$	$\frac{z^n}{(2n+1)!!}$	$\frac{1}{z} \sin \left( z - \frac{n\pi}{2} \right)$
$n_n(z)$	$-(2n-1)!! z^{-n-1}$	$-\frac{1}{z} \cos \left( z - \frac{n\pi}{2} \right)$
$h_n^{(1)}$	$-i(2n-1)!! z^{-n-1}$	$(-i)^{n+1} \frac{e^{iz}}{z}$
$h_n^{(2)}(z)$	$i(2n-1)!! z^{-n-1}$	$i^{n+1} \frac{e^{-iz}}{z}$
$i_n(z)$	$\frac{z^n}{(2n+1)!!}$	$\frac{e^z}{2z}$
$k_n(z)$	$\frac{(2n-1)!!}{z^{n+1}}$	$\frac{e^{-z}}{z}$

где  $\alpha_{nm}$  — корни функции  $J_n(z)$ , приведенные в верхней части табл. 28.4. При  $m = p$  мы получаем условие нормировки

$$\int_0^\infty [J_n(\alpha_{nm}\rho/a)]^2 \rho d\rho = \frac{1}{2}a^2 [J_{n+1}(\alpha_{nm})]^2. \quad (52)$$

Модифицированное уравнение Бесселя (34) имеет знак минус перед скобкой с  $z^2$  и  $n^2$

$$z^2 \frac{d^2 J_n(z)}{dz^2} + z \frac{dJ_n(z)}{dz} - (z^2 + n^2) J_n(z) = 0, \quad (53)$$

и его решениями являются функции Бесселя комплексного аргумента  $J_n(iz)$ , называемые модифицированными функциями Бесселя и обозначаемые  $I_n(z)$ , которые определяются формулами

$$I_n(z) = i^{-n} J_n(iz). \quad (54)$$

Вторыми линейно независимыми модифицированными функциями Бесселя являются функции

$$K_n(z) = \frac{\pi}{2} i^{n+1} H_n^{(1)}(iz), \quad (55)$$

которые, конечно, могут быть представлены в виде бесконечных рядов и подчиняются рекуррентным соотношениям. Зависимость функций  $I_0, I_1, K_0$  и  $K_1$  от  $z$  приведена на рис. 28.2.

В предыдущем разделе мы показали, что радиальная часть (38) уравнения Гельмгольца в сферических координатах (35) может быть преобразована в уравнение Бесселя (40) для функций полученного порядка. Решениями в данном случае являются сферические функции Бесселя и сферические функции Неймана

$$j_n(z) = (\pi/2z)^{1/2} J_{n+1/2}(z), \quad (56)$$

$$n_n(z) = (\pi/2z)^{1/2} N_{n+1/2}(z) = (-1)^{n+1} (\pi/2z)^{1/2} J_{-n-1/2}(z), \quad (57)$$

а также соответствующие им сферические функции Ганкеля

$$h_n^{(1)}(z) = j_n(z) + i n_n(z), \quad (58a)$$

$$h_n^{(2)}(z) = j_n(z) - i n_n(z). \quad (58b)$$

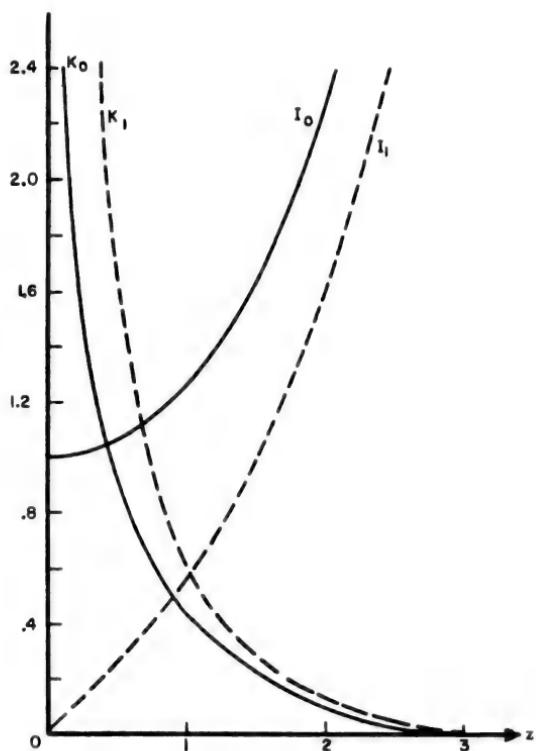


Рис. 28.2. Зависимость модифицированных функций Бесселя  $I_0(z)$  и  $I_1(z)$ , а также модифицированных функций Ганкеля  $K_0(z)$  и  $K_1(z)$  от аргумента  $z$ . (Из книги: *M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions*, NIST, Maryland, 1970, p. 375.)

Выписав разложение этих функций в бесконечные ряды, можно показать, что функции низшего порядка имеют следующий вид:

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad (59)$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}, \quad (60)$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}, \quad (61)$$

$$n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}, \quad (62)$$

$$h_0^{(1)}(z) = -\frac{ie^{iz}}{z}, \quad (63)$$

$$h_1^{(1)} = e^{iz} \left( -\frac{1}{z} - \frac{i}{z^2} \right), \quad (64)$$

$$h_0^{(2)}(z) = \frac{ie^{-iz}}{z}, \quad (65)$$

$$h_1^{(2)}(z) = e^{-iz} \left( -\frac{1}{z} + \frac{i}{z^2} \right). \quad (66)$$

Эти выражения удовлетворяют соотношениям рекуррентности и ортогональности, а их асимптотические представления при малых и больших значениях  $z$  приведены в табл. 28.5.

Модифицированные сферические функции Бесселя можно также определить с помощью уравнений

$$i_n(z) = (\pi/2z)^{1/2} I_{n+1/2}(z), \quad (67a)$$

$$k_n(z) = (2/\pi z)^{1/2} K_{n+1/2}(z) \quad (67b)$$

с особыми случаями  $n = 0$ :

$$i_0(z) = \frac{\sinh z}{z} \quad (68)$$

и

$$k_0(z) = \frac{e^{-z}}{z} \quad (69)$$

Соответствующие асимптотики также приведены в табл. 28.5.

## 6. ПОЛИНОМЫ ЛЕЖАНДРА

Решениями дифференциального уравнения Лежандра

$$(1 - z^2) \frac{d^2 P_n(z)}{dz^2} - 2z \frac{dP_n(z)}{dz} + n(n+1)P_n(z) = 0 \quad (70)$$

являются полиномы Лежандра, приведенные в табл. 28.2 и 28.3. Их можно определить с помощью производящей функции  $(1 - 2zt + t^2)^{-1/2}$ ,

$$\frac{1}{(1 - 2zt + t^2)^{1/2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(z)t^n \quad |t| < 1, \quad (71)$$

которая возникает при разложении величины  $1/r_{12}$  в сферических координатах в ряд

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{r_>} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{r_<}{r_>} \right) P_n(\cos \theta), \quad (72)$$

где  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ,  $t = r_</r_>$  и  $z = \cos \theta$ . Полиномы Лежандра можно рассматривать как предельный случай так называемых ультрасферических полиномов, или полиномов Гегенбауэра  $C_n^\alpha(z)$ , которые могут быть получены из производящей функции более общего вида, а именно

$$\frac{1}{(1 - 2zt + t^2)^\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^\alpha(z) t^n, \quad (73)$$

где  $\alpha = 1/2$  отвечает полиномам Лежандра,  $\alpha = 1$  — полиномам Чебышева второго рода и  $\alpha = 0$  — полиномам Чебышева первого рода.

Полиномы Лежандра можно также вычислить, используя формулу Родригеса

$$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!} \left( \frac{d}{dz} \right)^n (z^2 - 1)^n. \quad (74)$$

Для этих полиномов существует ряд рекуррентных соотношений типа

$$(2n + 1)zP_n(z) = (n + 1)P_{n+1}(z) + nP_{n-1}(z), \quad (75a)$$

$$P'_{n+1}(z) + P'_{n-1}(z) = 2zP'_n(z) + P_n(z), \quad (75b)$$

$$P'_{n+1}(z) - P'_{n-1}(z) = (2n + 1)P_n(z), \quad (75c)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ , а  $P'_n(z) = dP_n(z)/dz$  — производная полинома  $P_n(z)$ . Четность полиномов Лежандра выражается формулой

$$P_n(-z) = (-1)^n P_n(z), \quad (76)$$

причем в особых точках ( $n = 1, -1$ )

$$P_n(1) = 1, \quad (77)$$

$$P_n(-1) = (-1)^n. \quad (78)$$

Полиномы Лежандра удовлетворяют условию ортогональности

$$\int_{-1}^1 P_n(z) P_m(z) dz = \frac{2\delta_{mn}}{2n + 1}, \quad (79)$$

которое эквивалентно

$$\int_0^\pi P_m(\cos \theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2\delta_{mn}}{2n + 1}, \quad (80)$$

поскольку  $z = \cos \theta$ .

Присоединенное уравнение Лежандра

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \right) + \left[ n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_n^m(\cos \theta) = 0 \quad (81)$$

может быть записано в более простой форме (при замене переменной  $\cos \theta$  на  $z$ )

$$(1-z^2) \frac{d^2 P_n^m(z)}{dz^2} - 2z \frac{dP_n^m(z)}{dz} + \left[ n(n+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right] P_n^m(z) = 0. \quad (82)$$

Его решением являются присоединенные полиномы Лежандра  $P_n^m(z)$ , которые получаются дифференцированием обычных полиномов Лежандра

$$P_n^m(z) = (1-z^2)^{m/2} \frac{d^m P_n(z)}{dz^m}, \quad (83)$$

где по определению  $P_n^0(z) = P_n(z)$ . Присоединенные полиномы Лежандра низшего порядка приведены в табл. 28.3.

Соотношения четности для этих полиномов имеют вид

$$P_n^m(-z) = (-1)^{m+n} P_n^m(z), \quad (84)$$

а значения в граничных точках равны

$$P_n^m(\pm 1) = 0 \quad m \neq 0, \quad (85a)$$

$$P_m^m(\pm 1) = (-1)^n \quad m = 0. \quad (85b)$$

Для присоединенных полиномов Лежандра выполняются условия ортогональности в виде

$$\int_{-1}^1 P_n^m(z) P_p^m(z) dz = \frac{2(n+m)! \delta_{np}}{(2n+1)(n-m)!}. \quad (86)$$

При решении физических задач возникают и некоторые другие полиномы, свойства которых приведены в табл. 28.2 и 28.3. Они встречаются довольно редко, поэтому мы и не рассматриваем их столь же подробно, как полиномы Лежандра.

## 7. СФЕРИЧЕСКИЕ ГАРМОНИКИ

Сферическими гармониками  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$  называют нормированные функции вида  $P_L^M(\cos \theta) e^{iM\varphi}$ , представляющие собой произведения присоединенных полиномов Лежандра  $P_L^M$  на коэффициенты  $e^{iM\varphi}$ ,

$$Y_{LM}(\theta, \varphi) = (-1)^M \left( \frac{2L+1}{4\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right)^{1/2} P_L^M(\cos \theta) e^{iM\varphi}. \quad (87)$$

Они могут быть записаны как в декартовых, так и в полярных координатах. Ниже, в формулах (88) – (90), приводится конкретный вид сферических гармоник для  $L = 0, 1, 2$  без нормировочных коэффициентов и без учета знаков. В табл. 28.6 сферические гармоники

приведены в нормированном виде для  $L = 0, 1, 2, 3$  (напомним, что  $e^{\pm i\varphi} = \cos \varphi \pm i \sin \varphi$ )

$$Y_{00} = 1, \quad (88)$$

$$Y_{1-1} = \frac{x - iy}{r} = \sin \theta e^{-i\varphi},$$

$$Y_{10} = z/r = \cos \theta, \quad (89)$$

$$Y_{11} = \frac{x + iy}{r} = \sin \theta e^{i\varphi},$$

$$Y_{2-2} = \frac{(x - iy)^2}{r^2} = \sin^2 \theta e^{-2i\varphi},$$

$$Y_{2-1} = \frac{z(x - iy)}{r^2} = \cos \theta \sin \theta e^{-i\varphi},$$

$$Y_{20} = \frac{3z^2 - r^2}{r^2} = 3 \cos^2 \theta - 1, \quad (90)$$

$$Y_{21} = \frac{z(x + iy)}{r^2} = \cos \theta \sin \theta e^{i\varphi},$$

$$Y_{22} = \frac{(x + iy)^2}{r^2} = \sin^2 \theta e^{2i\varphi}.$$

Таблица 28.6. Сферические гармоники  $Y_{LM}(\theta, \varphi)$  для  $L = 0, 1, 2, 3$ .

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_{33} = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{3i\varphi}$
$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$	$Y_{32} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2i\varphi}$
$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$Y_{31} = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{i\varphi}$
$Y_{1-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$	$Y_{3-1} = +\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{-i\varphi}$
$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$	$Y_{3-2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{-2i\varphi}$
$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^3 \theta - 1)$	$Y_{3-3} = +\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{-3i\varphi}$
$Y_{2-1} = +\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$	
$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}$	

Таблица 28.7. Тессеральные гармоники  $Z_{LM}^{C,S}(\theta, \varphi)$  для  $L = 0, 1, 2, 3$ .

$Z_{00}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
$Z_{10}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left[\frac{z}{r}\right]$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}[\cos \theta]$
$Z_{11}^C$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left[\frac{x}{r}\right]$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}[\sin \theta \cos \varphi]$
$Z_{11}^S$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left[\frac{y}{r}\right]$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}[\sin \theta \sin \varphi]$
$Z_{20}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left[\frac{3z^2 - r^2}{r^2}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}[3 \cos^2 \theta - 1]$
$Z_{21}^C$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\left[\frac{zx}{r^2}\right]$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}[\cos \theta \sin \theta \cos \varphi]$
$Z_{21}^S$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\left[\frac{yz}{r^2}\right]$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}[\cos \theta \sin \theta \sin \varphi]$
$Z_{22}^C$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\left[\frac{x^2 - y^2}{r^2}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}[\sin^2 \theta \cos 2\varphi]$
$Z_{22}^S$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\left[\frac{xy}{r^2}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}[\sin^2 \theta \sin 2\varphi]$
$Z_{30}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\left[\frac{5z^3 - 3z}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}[(5 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta]$
$Z_{31}^C$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{21}{2\pi}}\left[\frac{x(5z^2 - r^2)}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{21}{2\pi}}[(5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \varphi]$
$Z_{31}^S$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{21}{2\pi}}\left[\frac{y(5z^2 - r^2)}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{21}{2\pi}}[(5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \sin \varphi]$
$Z_{32}^C$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}}\left[\frac{(x^2 - y^2)z}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}}[\sin^2 \theta \cos \theta \cos 2\varphi]$
$Z_{32}^S$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}}\left[\frac{xyz}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{\pi}}[\sin^2 \theta \cos \theta \sin 2\varphi]$
$Z_{33}^C$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}\left[\frac{x(x^2 - y^2)}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}[\sin^3 \cos 3\varphi]$
$Z_{33}^S$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}\left[\frac{y(x^2 - y^2)}{r^3}\right]$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}[\sin^3 \theta \sin 3\varphi]$

Сферические гармоники  $Y_{LL}(\theta, \varphi)$  и  $L_{LL-1}(\theta, \varphi)$  всегда имеют вид

$$Y_{LL} = \frac{(x + iy)^L}{r^L} = \sin^L \theta e^{L i \varphi}, \quad (91)$$

$$Y_{LL-1} = \frac{z(x + iy)^{L-1}}{r^L} = \cos \theta \sin^{L-1} \theta e^{(L-1)i\varphi}, \quad (92)$$

и аналогичные соотношения справедливы для случаев  $M = -L$  и  $M = -L + 1$ .

Сферические гармоники удовлетворяют условиям ортогональности

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_{L,M}^*(\theta, \varphi) Y_{L',M'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{L,L'} \delta_{M,M'} \quad (93)$$

и правилу сумм

$$\sum_{M=-L}^L |Y_{LM}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2L+1}{4\pi}. \quad (94)$$

Справедлива теорема сложения сферических гармоник, в соответствии с которой

$$P_L(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2L+1} \sum_{M=-L}^L (-1)^M Y_{LM}(\theta_1 \varphi_1) Y_{L-M}(\theta_2 \varphi_2), \quad (95)$$

где  $\gamma$  — угол между направлениями, определяемыми углами  $\theta_1, \varphi_1$  и  $\theta_2, \varphi_2$  [ $\cos \gamma = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ ].

Тессеральные гармоники  $Z_{LM}^{S,C}(\theta, \varphi)$  являются действительными частями сферических гармоник, которые возникают из линейных комбинаций вида  $Y_{LM}(\theta, \varphi) \pm Y_{L-M}(\theta, \varphi)$ . Их ненормированные значения приведены в гл. 10 (для значений  $L = 0, 1, 2$ ), а нормированные — в табл. 28.7. Для  $M = 0$  всегда справедливо равенство  $Y_{00} = Z_{00}$ . Тессеральные гармоники появляются в действительных решениях задач с потенциалом в сферических координатах, поскольку потенциал представляет собой действительную величину.

## 8. ГАММА-ФУНКЦИЯ И РОДСТВЕННЫЕ ЕЙ ФУНКЦИИ

Гамма-функция определяется уравнением

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad (96)$$

где в общем случае  $z = x + iy$  — комплексное число. Если  $z$  — целое число, то гамма-функция принимает значение факториала

$$\Gamma(n+1) = n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdots (n-1)n \quad (97)$$

со следующими специальными значениями:

$$\Gamma(2) = \Gamma(1) = 1! = 0! = 1, \quad (98)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}. \quad (99)$$

Таблица 28.8. Численные значения гамма-функции для некоторых значений аргумента.

Функция	Численное значение	Функция	Численное значение
$\Gamma_{(1)} = 0!$	1	$\Gamma_{(1/4)}$	3,626
$\Gamma_{(2)} = 1!$	1	$\Gamma_{(1/3)}$	2,679
$\Gamma_{(3)} = 2!$	2	$\Gamma_{(2/3)}$	1,354
$\Gamma_{(4)} = 3!$	6	$\Gamma_{(3/4)}$	1,225
$\Gamma_{(5)} = 4!$	24		
$\Gamma_{(1/2)}$	$\sqrt{\pi} = 1,772$	$\Gamma_{(-1/2)}$	$-2\sqrt{\pi} = -3,545$
$\Gamma_{(3/2)}$	$\sqrt{\pi}/2 = 0,886$	$\Gamma_{(-3/2)}$	$4\sqrt{\pi}/3 = 2,363$
$\Gamma_{(5/2)}$	$3\sqrt{\pi}/4 = 1,329$	$\Gamma_{(-5/2)}$	$-8\sqrt{\pi}/15 = -0,945$
$\Gamma_{(7/2)}$	$15\sqrt{\pi}/8 = 3,323$	$\Gamma_{(-7/2)}$	$16\sqrt{\pi}/105 = 0,270$
$\Gamma_{(9/2)}$	$105\sqrt{\pi}/16 = 11,63$		

Для отрицательных значений  $z$  гамма-функция может быть найдена из соотношения

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}. \quad (100)$$

Другое определение гамма-функции, предложенное Эйлером, связано с предельным переходом

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \dots (n-1)n(n^z)}{z(z+1)\dots(z+n)}; \quad z \neq 0, -1, -2, \dots \quad (101)$$

Определение Вейерштрасса имеет вид

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = ze^{\gamma z} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{n}\right) e^{-z/n}, \quad (102)$$

где значение постоянной Эйлера — Маскерони  $\gamma$  определяется следующим двойным пределом:

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - \ln(n) \right] = 0,5772156649 \dots \quad (103)$$

Для значений  $Re z > 0$  справедливы три интегральных представления Эйлера, имеющие вид

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt = 2 \int_0^\infty e^{-t^2} t^{2z-1} dt = \int_0^1 [\ln(1/t)]^{z-1} dt. \quad (104)$$

В табл. 28.8. приведены численные значения гамма-функции для нескольких значений аргумента, а на рис. 28.3 показана зависи-

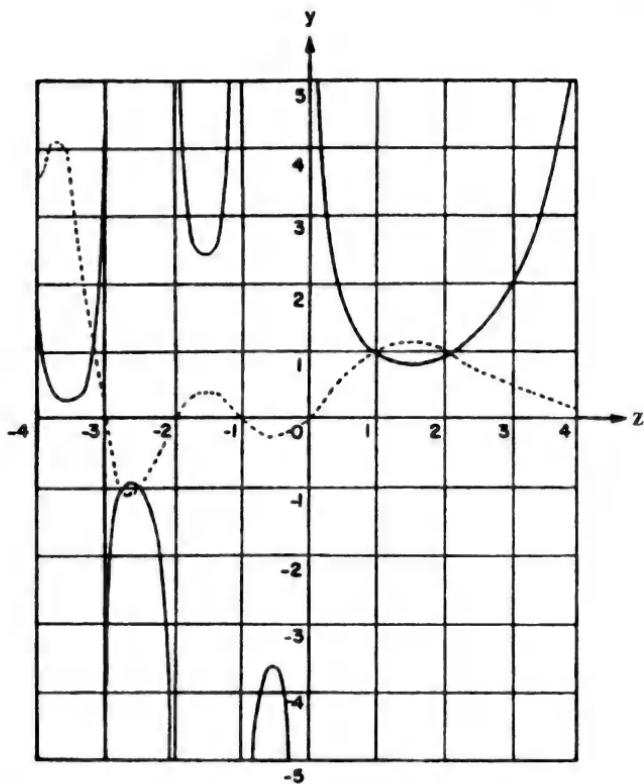


Рис. 28.3. Зависимость гамма-функции  $y = \Gamma(z)$  (сплошная линия) и обратной гамма-функции  $y = 1/\Gamma(z)$  (пунктир) от действительных значений переменной  $z$ . (Из книги: M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, NIST, Maryland, 1970, p. 255.)

мость прямой  $\Gamma(z)$  и обратной  $1/\Gamma(z)$  гамма-функций от  $z$ . Неполная гамма-функция, соответствующая  $\Gamma(1/2)$  с конечным верхним или нижним пределом интегрирования, используется для определения интеграла ошибок

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt, \quad (105)$$

$$\text{erfc}(z) = 1 - \text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-t^2} dt, \quad (106)$$

где

$$\operatorname{erf}(\infty) = 1. \quad (107)$$

Для дзета-функции Римана, определяемой как

$$\zeta(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^z}, \quad (108)$$

можно показать, что

$$\ln(z!) = -\gamma z + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{z^n}{n} \zeta(n). \quad (109)$$

Наилучшим приближением факториала при больших значениях  $z$  ( $z \gg 1$ ) является разложение Стирлинга

$$\ln(z!) = \frac{1}{2} \ln 2\pi + \left(z + \frac{1}{2}\right) \ln z - z + \frac{1}{12z} - \frac{1}{360z^3}, \quad (110)$$

где два последних члена в правой части пренебрежимо малы при больших  $z$ .

Дигамма-функция  $F(z)$  имеет вид

$$F(z) = -\gamma + \sum_{m=1}^{\infty} \left( \frac{1}{m} - \frac{1}{(z+m)} \right), \quad (111)$$

где  $\gamma$  — постоянная Эйлера — Маскерони, определенная выше формулой (103).

Бета-функция  $B(m, n)$  равна

$$B(m, n) = \frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)} = \frac{(m-1)!(n-1)!}{(m+n-1)!} \quad (112)$$

и имеет два интегральных представления

$$B(m+1, n+1) = \int_0^1 t^m (1-t)^n dt = \int_0^{\infty} \frac{u^m du}{(1+u)^{m+n+2}}. \quad (113)$$

Кроме того, бета-функция может быть записана в виде определенного интеграла

$$B(m+1, n+1) = 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2m+1} \theta \sin^{2n+1} \theta d\theta, \quad (114)$$

который возникает при подстановке  $t = \cos \theta$  в предыдущее уравнение.

Существует еще несколько важных и полезных соотношений, связанных с факториальным разложением. Прежде всего, следует отметить формулу удвоения Лежандра

$$z! \left(z - \frac{1}{2}\right)! = 2^{-2z} \pi^{1/2} (2z)!, \quad (115)$$

которая для целочисленных значений  $z$  принимает вид

$$(n + \frac{1}{2})! = \frac{\pi^{1/2}(2n + 1)!!}{2^{n+1}}, \quad (116)$$

где знак удвоенного факториала обозначает следующее:

$$(2n + 1)!! = (2n + 1)(2n - 1) \dots 5 \cdot 3 \cdot 1, \quad (117)$$

$$(-1)!! = 1, \quad (118)$$

$$(2n)!! = (2n)(2n - 2) \dots 4 \cdot 2, \quad (119)$$

$$0!! = 1. \quad (120)$$

Двойной факториал связан с обычным соотношениями

$$(2n + 1)!! = \frac{(2n + 1)!}{2^n n!}, \quad (121)$$

$$(2n)!! = 2^n n!. \quad (122)$$

## 9. ДЕЛЬТА-ФУНКЦИЯ

Идеальная дельта-функция  $\delta(x - a)$  равна бесконечности в точке  $x = a$  и нулю во всех остальных точках

$$\delta(x - a) = 0 \quad x \neq a, \quad (123)$$

так что интеграл от нее равен единице

$$\int \delta(x - a) dx = 1. \quad (124)$$

Произвольная функция  $f(x)$  имеет в точке  $x = a$  значение  $f(a)$

$$f(a) = \int f(x) \delta(x - a) dx. \quad (125)$$

Дельта-функция симметрична относительно аргумента

$$\delta(x - y) = \delta(y - x). \quad (126)$$

Она может быть получена с помощью лапласиана поля точечного заряда

$$\nabla^2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} = -4\pi \delta(r_1 - r_2), \quad (127)$$

а также лапласиана функции Грина  $G(x; y)$

$$\nabla^2 G(x - y) = -4\pi \delta(x - y). \quad (128)$$

Дельта-функцию часто определяют как предел

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x), \quad (129)$$

где последовательность функций  $\delta_n(x)$  можно выбрать различными способами:

$$\delta_n(x) = \frac{\sin nx}{\pi x} \quad \text{определение Дирихле,} \quad (130)$$

$$\delta_n(x) = (n/\sqrt{\pi}) \exp(-n^2 x^2) \quad \text{определение Гаусса,} \quad (131)$$

$$\delta_n(x) = \frac{n/\pi}{1 + n^2 x^2} \quad \text{определение Лоренца,} \quad (132)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-n}^n e^{inx} dn \quad \text{определение Фурье.} \quad (133)$$

## 10. ФУНКЦИИ ГРИНА

Для простоты мы рассмотрим функции Грина только в одномерном случае. Предположим, что нам надо решить неоднородное уравнение Гельмгольца

$$\Psi'' + k^2 \Psi = -f(x) \quad 0 \leq x \leq a \quad (134)$$

с граничными условиями

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0, \quad (135)$$

причем нам известны два решения  $\phi_1(x) = \sin kx$ , и  $\phi_2(x) = \cos kx$  соответствующего однородного уравнения.

$$\phi'' + k^2 \phi = 0. \quad (136)$$

Предполагая, что решение (134) имеет вид

$$\Psi(x) = A(x) \sin kx + B(x) \cos kx, \quad (137)$$

где функции  $A(x)$  и  $B(x)$  могут быть найдены посредством некоторых математических операций, мы можем определить функцию Грина в явном виде

$$G(x; y) = \frac{\sin ky \sin k(a - x)}{k \sin ka} \quad 0 \leq y \leq x, \quad (138a)$$

$$G(x; y) = \frac{\sin kx \sin(a - y)}{k \sin ka} \quad x \leq y \leq a, \quad (138b)$$

который соответствует решению уравнения для дельта-функции

$$G'' + k^2 G = -\delta(x - y). \quad (139)$$

Решение исходного уравнения Гельмгольца (134) при этом имеет вид

$$\Psi(x) = \int_0^a f(y) G(x; y) dy, \quad (140)$$

где, разумеется, функция  $f(y)$  предполагается известной. Аналогичный подход может быть применен для двух- и трехмерных задач.

Следует отметить пять важных свойств функции Грина:

1. Функция Грина удовлетворяет однородному уравнению (136) на каждом интервале  $0 \leq y < x$  и  $x < y \leq a$ , но не в точке  $y = x$ .
2. Функция Грина непрерывна в точке  $y = x$ , т. е.

$$G(x; x^+) = G(x; x^-), \quad (141)$$

где  $x^+$  и  $x^-$  означают приближение к точке  $x$  справа и слева, соответственно.

3. Производная функции Грина разрывна при  $y = x$

$$G'(x; x^+) - G'(x; x^-) = -1, \quad (142)$$

а поскольку  $G'$  разрывна, вторая производная  $G''$  не существует.

4. Функция Грина удовлетворяет граничным условиям

$$G(x; 0) = G(x; a). \quad (143)$$

5. Функция Грина симметрична относительно перестановки  $x$  и  $y$ :

$$G(x; y) = G(y; x). \quad (144)$$

Знание этих свойств может оказаться полезным при построении функций Грина в различных задачах.

## ЛИТЕРАТУРА

---

### МЕХАНИКА — ГЛ. 1—5

*B. И. Арнольд*, Математические методы классической механики. — М.: Наука, 1974.

*A. L. Fetter, J. D. Walecka*, Theoretical Foundations of Particles and Continuous Media, McGraw-Hill, New York, 1980.

*H. Goldstein*, Classical Mechanics, Addison-Wesley, 2d ed., Readind, MA, 1980.

*D. Hestenes*, New Foundations for Classical Mechanics, Reidel, Dordrecht, Holland, 1986.

*Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, Механика. — М.: Физматгиз, 1958.

### НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА И ХАОС — ГЛ. 6

*A. B. Cambel*, Applied Theory, Academic Press, New York, 1993.

*R. J. Creswick, H. A. Farach, C. P. Poole, Jr.*, Introduction to Renormalization Group Methods in Physics, Wiley, New York, 1992.

*M. Hénon*, Numerical Exploration of Hamiltonian Systems, Course 2 in *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, Les Houches École de Physique Théoretique, 1981.

*E. A. Jackson*, Perspectives of Nonlinear Dynamics, 2 Vols, Cambridge University Press, Cambridge, 1989.

*H. O. Peitgen, H. Jürgens, D. Saupe*, Chaos and Fractals, New Frontier of Science, Springer Verlag, 1992.

### ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ — ГЛ. 7

*Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, Теоретическая физика, т. II, Теория поля. — М.: Наука, 1988.

*H. M. Schwartz*, Introduction to Special Relativity, McGraw-Hill, New York, 1968.

*B. F. Schultz*, A First Course in General Relativity, Cambridge, 1985.

*S. Weinberg*, Gravitation and Cosmology, Wiley, New York, 1972.

## ТЕРМОДИНАМИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА — ГЛ. 8, 9

*H. B. Callen*, Thermodynamics and an Introduction to the Thermostatics, Wiley, New York, 1985.

*K. Huang*, Statistical Mechanics, Wiley, New York, 1963. [Имеется перевод: *К. Хуанг*, Статистическая механика. — М.: Мир, 1966.]

*C. Kittel, H. Kroemer*, Thermal Physics, Freeman, 1980.

## ЭЛЕКТРОДИНАМИКА — ГЛ. 10–12, 15, 16

*J. D. Jackson*, Classical Electrodynamics, 2d ed., Wiley, New York, 1975. [Имеется перевод: *Дж. Джексон*, Классическая электродинамика. — М.: Мир, 1965.]

*Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, Теоретическая физика, т. VIII, Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982.

*H. C. Ohanian*, Classical Electrodynamics, Allyn-Bacon, Boston, 1988.

*A. M. Portis*, Electromagnetic Fields, Wiley, New York, 1978.

*E. M. Purcell*, Electricity and Magnetism, Berkeley Series, vol. 2, McGraw-Hill, New York, 1985. [Имеется перевод: *Э. Парсель*, Электричество и магнетизм, изд. 3-е. — М.: Наука, 1983.]

## ОПТИКА — ГЛ. 13 И 14

*E. Hecht, A. Zajac*, Optics, 3d ed., Addison-Wesley, Reading, MA, 1998.

*S. G. Lipson, H. Lipson, D. S. Tannhauser*, Optical Physics, Cambridge, UK, 1995.

*J. R. Meyer-Arendt*, Introduction to Classical and Modern Optics, Prentice-Hall, New Jersey, 1995.

*F. L. Pedrotti, L. S. Pedrotti*, Introduction to Optics, 2d ed., Prentice-Hall, New Jersey, 1993.

## КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА — ГЛ. 17–22

гл. 17–22

*G. Baym*, Lectures on Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Redwood City, CA, 1990.

*C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe*, Quantum Mechanics, Wiley, New York, 1977.

*A. Messiah*, Quantum Mechanics, 2 vols, North Holland, Amsterdam, 1968. [Имеется перевод: *А. Мессиа*, Квантовая механика, т. 1 и 2. — М.: Наука, 1978.]

*J. J. Sakurai*, Modern Quantum Mechanics, Addison Wesley, 1994.

## ТВЕРДЫЕ ТЕЛА — ГЛ. 23, 24

*N. W. Ashcroft, N. D. Mermin*, Solid State Physics, Saunders, Philadelphia, 1976. [Имеется перевод: *Н. Ашкрофт, Н. Мермин*, Физика твердого тела, т. 1 и 2. — М.: 1979.]

*G. Burns*, Solid States Physics, Academic Press, New York, 1985.

*C. Kittel*, Solid State Physics, 7th ed., Wiley, New York, 1996. [Имеется перевод: Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела, пер. с 4-го изд. — М.: Наука, 1978.]

## ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА — ГЛ. 25, 26

*J. W. Rohlf*, Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$ , Wiley, New York, 1994.

*D. Griffiths*, Introduction to Elementary Particles, Harper and Row, New York, 1987.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА — ГЛ. 27, 28

гл. 27, 28

*G. Arfken, H. J. Weber*, Mathematical Methods for Physicists, 4th ed., Academic Press, New York, 1995.

*R. Courant, D. Hilbert*, Methods of Mathematical Physics, 2 vols, Wiley, New York, 1953, [Имеется перевод: Р. Курант, Д. Гильберт, Методы математической физики, т. 1–2. — М.: Гостехиздат, 1951.]

*S. Hassani*, Foundations of Mathematical Physics, Allyn and Bacon, Boston, 1991.

*H. S. Jeffreys, B. S. Jeffreys*, Methods of Mathematical Physics, Cambridge, 1956. [Имеется перевод: Г. Джессефрис, Б. Джессефрис, Методы математической физики, вып. 1–3. — М.: Мир, 1969.]

*P. M. Morse, H. Feshbach*, Methods of Theoretical Physics, 2 vols., McGraw-Hill, New York, 1953. [Имеется перевод: Ф. М. Морс, Г. Фешбах, Методы теоретической физики, т. 1–2. — М.: ИЛ, 1958.]

*E. T. Whittaker, G. N. Watson*, A Course of Modern Analysis, 4th ed., Cambridge, 1952. [Имеется перевод: Э. Т. Уиттакер, Дж. Н. Уатсон, Курс современного анализа, т. 1–2. — М.: Физматгиз, 1962–63.]

## СПРАВОЧНИКИ — ГЛ. 27, 28.

*M. Abramowitz, I. A. Stegun*, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1972. [Имеется перевод: М. Абрамович, И. Стиган. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами. — М.: Наука, 1979.]

*H. L. Anderson*, Ed., A Physicist's Desk Reference (ранее Physics Vade Mecum), American Institute of Physics Press, New York, 1989.

*E. R. Cohen*, Physics Quick Reference Guide, American Institute of Physics Press, New York, 1996.

*E. Jahnke, F. Emde*, Tables of Functions, Dover, New York, 1945; McGraw-Hill, New York, 1960. [Имеется перевод: Е. Янке, Ф. Эмде, Специальные функции. — М.: Наука, 1968.]

*R. W. Weast, D. R. Lide*, eds., Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press, Boca Raton, FL, 1997 — 1998.

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

---

**А**вогадро постоянная 115, 302, 325  
Адиабатическое размагничивание 132, 133  
Адрон 361  
Аксиальный вектор 43  
Ансамбль 125  
— канонический 127, 128  
— большой 128  
— микроканонический 126  
Антибарион 365  
Антикварк 362, 365, 367  
Антингейтрино 355  
Античастица 366  
Аттрактор 79, 82

**Б**арийон 361, 365  
Барийонное число 365, 367  
*Бесселя* уравнение 418, 423, 427  
— функции 152, 255, 416, 419, 423  
— модифицированные 427, 432  
— сферические 255, 432  
*Био—Савара* закон 155  
Бифуркации 81, 82  
*Бозе—Эйнштейна* конденсация 139  
— распределение 137  
— статистика 136, 137  
Бозон 364, 366  
*Больцмана* постоянная 127  
— соотношение 128  
Боровский радиус 167, 277, 320  
*Браве* решетка 311, 312, 317  
*Бриллюэна* зона 319, 330, 331, 401  
— функция 132

Броуновское движение 306  
*Брэгга* закон 316  
*Брюстера* угол 189, 205  
Буст 102, 175

**В**ан-дер-Ваальса газ 304  
— — — постоянные 303  
— — — сила 302  
— — — уравнение 113, 303  
*Вейцзеккера* формула 351  
*Вигнера—Зейтца* ячейка 317, 319  
*Видемана—Франца* закон 119, 123, 329  
*Викоффа* структуры 313  
Волноводы 194  
*Вольтерры* уравнение 403  
Вязкость 307

**Г**алилея преобразования 92, 93, 95  
*Гамильтон*а принцип 15  
— уравнение 13, 66  
— функция главная 69  
— — характеристическая 69  
*Гамильтон*а—*Якоби* уравнение 69, 74  
Гамильтониан 13, 17, 69  
— вращения 61, 62  
— гармонического осциллятора 18, 67  
— интегрируемый 73  
— *Кеплера* задача 17, 18  
— колебания 63  
— неинтегрируемый 73  
— полный 77

- симметричного волчка 18, 62
- теория возмущений 73
- *Хенона–Хейла* 85, 86
- Ганкеля* преобразования 401
- функция 430
- Гаусса* закон 147
- Гегенбауэра* полиномы 435
- Гейзенберга* соотношение 399
- Гексадекаполь 159
- Гелл–Манна–Нишидэсими* формула 366, 367
- Гельмгольца* свободная энергия 111, 112, 124, 130
- уравнение 425, 427
- Гиббса* правило фаз 113, 114
- свободная энергия 111, 112, 114, 129, 130
- Гипербола 27
- Гиромагнитное отношение 131
- Глюон 364
- Гравитон 364
- Грамма–Шмидта* процедура 425
- Границные условия 146, 147, 151, 152
  - *Дирихле* 151
  - *Коши* 151
  - на границе раздела двух сред 146, 147
  - *Неймана* 151
- Грина* теорема 383
- функция 152, 443, 444
- Групп теория 408
- Гука* закон 29
- Гюйгенса* волны 206
- принцип 205
- Даламбера* оператор 102
- Дебая* температура 61, 117
- удельная теплоемкость 61, 117, 131
  - частота 61
- Действие — угол переменные 70
- Деполяризации коэффициент 168, 169
- Диполь электрический 158, 159, 164
  - – взаимодействие 164
  - – матричный элемент 173
  - – наведенный 303
- – поле 161, 164
- – магнитный 163
- – взаимодействие 164
- – момент силы 164
- – правила отбора 172
- Дисперсионные соотношения 58, 59
- Дисперсия 190, 199
  - аномальная 199
  - нормальная 199
- Дифракция 205, 211
  - на многих щелях 206, 207
  - *Фраунгофера* 205, 209
  - *Френеля* 205
- Диффузия 308
- Длина волны комptonовская 198
  - критическая 194
- Доплера* эффект 100
- Друде* модель 325
- Дырка 340
- Дюлонга и Пти* закон 117, 118
- Заряд 162
  - движущийся в скрещенных полях Е и В 180
  - по спирали 183
  - равномерно 216
  - ускоренно 217
  - излучение 212
- Зарядовое сопряжение 104
- Затухания коэффициент 191
- Зеебека* коэффициент 119
  - эффект 119
- Зеемана* эффект 164, 181
  - – в атоме водорода 247, 293
- Идеального газа закон 302
  - – состояние 116, 117
- Изоспин 365, 367
- Импеданс вакуума 145, 185, 194, 195
- Инварианты адиабатические 182
- Интерференция 205, 207
- Испарение 113
- Итератор квадратичный 78
- Калибровка* кулоновская 180
  - *Лондона* 180
  - *Лоренца* 180

Калибровочные преобразования 179  
*Карно* цикл 108–110  
 Квадруполь электрический 158, 159  
 Квантовая хромодинамика 364, 377  
 Квантовое число атома водорода 278  
 -- барионное 365  
 -- главное 277  
 -- колебательное 63  
 -- орбитальное 278  
 Кварк 345, 346, 362, 365  
 -- истина, красота, очарование, цвет 377  
*Кейли–Клейна* параметры 389  
*Кельвина–Планка* формулировка 107  
*Кеплера* второй закон 24  
 -- задача 17, 18, 28  
*Клапейрона–Клаузиуса* уравнение 113, 114, 305  
*Клаузиуса* формулировка 107  
*Клейбша–Гордана* коэффициенты 233  
*Клейна–Гордона* уравнение 198  
*Колмогорова–Арнольда–Мозера* кривая 77  
 -- -- теорема 77  
 -- -- тор 77  
 Коммутатор 235  
*Кориолиса* сила 45, 46  
*Кортевега–де Фриса* уравнение 197  
*Коши* формула 431  
*Коши–Римана* условия 404  
 Краевая задача *Дирихле* 151, 152  
 -- *Коши* 151  
 -- *Неймана* 151  
*Крамерса–Кронига* соотношения 191  
*Кулона* закон 14, 150, 167, 362, 385  
*Лагерра* полиномы 254, 277, 279  
 -- уравнение 419  
*Лагранжса* множители 16  
 -- трех тел задача 36  
 -- уравнение 13  
*Лагранжиан* 13, 14  
 -- гармонический осциллятор 15  
 -- *Кеплера* задача 15  
 -- симметричный волчок 15  
 -- формулировка 14  
 Лазер 124  
*Ламжевена* уравнение 306, 307  
*Лапласа* преобразование 401, 403  
 -- уравнение 151, 404, 425  
*Лапласиан* 254  
*Лармора* приближение 219, 230  
*Леви – Чивита* коэффициент 72, 236  
*Лежандра* полиномы 254, 301, 420, 424, 435  
 -- -- присоединенные 419, 424  
 -- уравнение 423, 434  
 -- формула удвоения 442  
*Ленца* закон 157  
*Лептон* 361  
*Логистическое* уравнение 78  
 -- -- хаос 78, 79  
*Лорана* ряд 405  
*Лоренца* аттрактор 90  
 -- преобразование 93, 94, 101, 177  
 -- -- обобщенное 102  
 -- сила 14, 22, 180  
 -- сокращение 99  
 -- уравнение 89, 91  
 -- число 123  
*Лоренцева* форма линии 191, 400  
*Магическое* число 284, 353  
*Магнитная* постоянная 143, 145  
 -- -- вакуума 143  
*Магнитное* сопротивление 122  
*Магнитостатика* 142, 154  
*Мазер* 124  
*Майкельсона* интерферометр 207  
*Майкельсона–Морли* эксперимент 93  
*Максвелла–Больцмана* распределение 134  
 -- -- статистика 325  
*Масса* эффективная 167  
*Маттиссена* правило 328  
*Мезон* 361, 371  
*Меллина* преобразования 401  
*Мессбауэра* эффект 358, 359

Миллера индексы 315  
 Минковского пространство 93, 103  
 Модуляция 195  
*Мозли* закон 287, 290  
 Молекула, дипольный момент 64  
 – трехатомная 53  
 Момент импульса 24, 46, 233, 234  
 – – волновые функции 239  
 – – коммутатор 235  
 – – магнитный момент 165  
 – – орбитальный 236  
 – – полный 237  
 – – собственные значения 236  
 – – сохранение 24  
 – – спин 236  
 – – инерции 46  
 – – – главный 47  
 – – некоторых твердых тел 48  
 – – теорема 47  
 Монополь электрический 158, 159  
 Монте-Карло метод 381, 441  
 Мультиполь магнитный 163, 164  
 – электрический 159

**Н**еймана функция 423, 430  
 Нейтрино спиральность 357  
 Нейтрон 313, 345, 347, 350, 353  
 Нейтронная звезда 348  
 Неопределенности принцип 398  
*Нернста* коэффициент 121  
 – эффект 119  
 Нуклон 345, 348, 366  
*Ньютона* закон всемирного тяготения 22, 46  
 – – второй 13, 21, 100  
 – – – ковариантная форма 100  
 – – первый 23  
 – – кольца 207  
 – – механика 92

Октуполь электрический 159  
 Отражение 186, 189  
 Очарование 366

Парамагнетизм 131  
 – энтропия 133, 134  
*Паули* принцип запрета 350  
 – спиновая матрица 44, 244, 391  
*Пельте* коэффициент 123

– эффект 119, 121  
 Пион 99, 361, 366  
 Плавление 114  
 Плазма 193, 319  
 Плазмон 320  
*Планка* закон распределения 139  
 Поглощения коэффициент 190  
 Подвижность 307  
 Позитрон 355  
*Пойнтинга* вектор 145, 185  
 Полупроводник 323  
 – типа  $n$  329, 341  
 – –  $p$  329, 341  
 Поляризация 143, 203  
 – диэлектрическая 143  
 – круговая 204  
 – линейная 189, 203, 204  
 – решетки 320  
 – эллиптическая 204  
 Поляризуемость 64, 189  
 Поляритон 319  
 Полярон 320  
 Потенциал 30  
 – барьер 268  
 – векторный 145  
 – кулоновский 254  
 – одномерный 262  
 – скалярный 145, 150  
 – скачок 264  
 – слабый 333, 334  
 – степенная зависимость 30  
 – термодинамический 129  
 – химический 129, 325  
 Преломление 186, 187  
 – показатель 146, 185, 199  
 Призма 199  
 Проницаемость магнитная 143, 146  
 Протон 347  
 Псевдовектор 43  
 Псевдоскаляр 43  
 Псевдотензор 43  
*Пуанкаре* отображения 87, 88  
 – преобразование 102  
*Пуассона* скобки 71  
 – уравнение 152

Размагничивание 132  
 – адиабатическое 132

*Рака* коэффициенты 243  
 Распределение *Бозе—Эйнштейна* 138, 139  
 – *Максвелла* 134, 135  
 – – *Больцмана* 136  
 – *Планка* 139  
 – по скоростям 125  
 – *Ферми—Дирака* 117, 136, 139  
 – функции 125, 137  
*Рассела—Саундерса* связь 237  
*Рассеяние* 31, 229  
 – *Резерфорда* 32, 33  
 – *Томсона* 231  
*Рауса* функция 19  
*Рёссlera* аттрактор 87  
 – уравнение 88  
 – *Фейгенбаума* диаграмма 88, 89  
*Ричи—Ледюка* коэффициент 122  
 – – эффект 119, 121, 123  
*Ридберга* формула 277  
*Римана* дзета-функция 442  
*Родригеса* формула 435  
*Рэлея* диссипативная функция 17  
  
*Сверхпроводимость* 321  
*Сжатие* 52  
*Синус—Гордона* уравнение 198  
*Система координат* вращающаяся 45  
 – – инерциальная 45  
 – – неинерциальная 45  
*Снелла* закон 189  
*Спектроскопия* 63  
*Стефана—Больцмана* закон 139  
*Стокса* закон 14, 304  
 – теорема 383  
*Столкновения* 33  
 – кулоновские 225  
 – прицельный параметр 226  
 – с ядрами 229  
 – угол рассеяния 229  
*Странность* 366, 375  
  
*Тензор* 381, 392  
 – антисимметричный 174, 176  
 – изотропный 72  
 – инвариантный 174, 176  
 – ковариантный 174, 394  
 – контравариантный 174, 394  
 – неприводимый 243  
 – перестановок 72  
 – преобразование 42  
 – ранг 43  
 – свертка 176  
 – смешанный 394  
 – сферический 243  
 – электромагнитного поля 174  
 – – – дуальный 176  
*Теория относительности* 92  
*Теплота скрытая* 114, 115  
*Термодинамика* 105  
*Тессеральные гармоники* 153, 154  
*Томсона* соотношение 123  
 – рассеяние 231  
*Тонкой* структуры постоянная 278, 363  
*Тормозное излучение* 230, 231  
*Трение* 14, 322  
 – коэффициент 307  
*Трехкварковая* модель 366  
  
*Удельная теплоемкость* 108  
 – – вклад электронов проводимости 118  
 – – – дебаевское приближение 61, 117, 131  
 – – идеального газа 115  
 – – отношение 116  
 – – свободных электронов 118  
 – – твердого тела 117, 118  
*Удельное сопротивление* 122, 328  
 – – *Блоха* закон 328, 329  
  
*Фарадея* закон 156  
*Фейгенбаума* диаграммы 81–85  
 – предел 85  
 – число 85  
*Фейнмана* диаграмма 362, 363  
*Ферми* газ 325  
 – поверхность 330  
 – – сферическая 332  
 – скорость 322  
 – температура 118, 139, 330  
 – энергия 118, 119, 139, 330  
*Ферми—Дирака* распределение 138  
 – – – функция 138, 330  
 – – – статистика 117, 138, 330

*Ферми*—*Дирака* статистика 136,  
137  
— функция распределения 117

*Фермion* 361

*Фонон* 319

*Фотон* 361, 364

*Фредгольма* уравнение 403

*Фробениуса* метод 418

*Функция* распределения 124, 128  
— гармонического осциллятора  
130

*Фурье* закон 119  
— преобразование 397, 399  
— ряды 395

**Хаос** 73  
— возникновение 85  
— характеристики 83, 85

*Хартри*—*Фока* метод 290

*Холла* коэффициент 344  
— угол 123  
— эффект 122, 123, 342

*Чебышева* полиномы 420

*Черенковское* излучение 222

*Черная* дыра 348

*Четность* 43, 104, 278, 423  
— антикварка 371  
— бариона 374  
— гармонического осциллятора 261  
— кварка 371  
— мезона 371  
— несохранение 357  
— операции 104  
— прямоугольная потенциальная  
яма 272, 273

*Четыре*—вектор 94, 95, 97  
— времениподобный 96, 97  
— пространственноподобный 96,  
97  
— светоподобный 96, 97

*Шредингера* уравнение 62, 252,  
277, 297

*Штерна*—*Герлаха* эксперимент  
165

*Эйлера*—*Маскерони* постоянная  
395, 440, 442

*Эйлера* параметр 289  
— углы 15, 16  
— трех тел задача 35

*Эйнштейна* закон сложения ско-  
ростей 95

*Эйнштейна*—*Нернста* соотноше-  
ние 309

*Экситон* 167  
— *Ванье*—*Мотта* 320  
— *Френкеля* 320, 321

*Электрическая* постоянная 143,  
145, 190  
— вакуума 143

*Электростатика* 142, 150

*Эллиптическая* орбита 26, 28  
— афелий 26  
— перигелий 26

*Энергия* 13  
— взаимодействия частиц 14  
— внутренняя 110, 111, 124  
— зоны 322  
— запрещенной 334  
— полупроводников 341  
— свободного электрона 334  
— кинетическая 14  
— плотность 144, 145  
— свободная 110, 111, 114, 124  
— связи ядра 348  
— средняя 129

*Энталпия* 110, 111

*Энтропия* 107, 132  
— изменение 114  
— парамагнитного образца  
133

— перенос 119

— плотность 118

— системы спинов 134

*Эрмита* полиномы 259, 424  
— уравнение 419

*Эттинггаузена* коэффициент  
123  
— эффект 119, 123

**Юнга** модуль 51  
— эксперимент 208

**Ядро** 229, 347

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

Предисловие редактора перевода .....	5
Предисловие .....	7
<b>Физические постоянные .....</b>	<b>9</b>
1.Фундаментальные постоянные .....	9
2.Электромагнитные постоянные .....	10
3.Переводные множители .....	10
4.Характерные длины .....	10
5.Характерные интервалы времени .....	11
6.Свойства частиц .....	12
<b>Глава 1. Уравнения Лагранжа и Гамильтона .....</b>	<b>13</b>
1.Введение .....	13
2.Подход, основанный на законе Ньютона .....	13
3.Формулировка с использованием лагранжиана .....	14
4.Формулировка с использованием гамильтониана .....	17
5.Вариационные принципы и виртуальные перемещения .....	19
<b>Глава 2. Центральные силы .....</b>	<b>21</b>
1.Введение .....	21
2.Действие и противодействие .....	21
3.Задача двух тел в случае центральных сил .....	22
4.Уравнения движения и орбиты .....	25
5.Ограниченные и замкнутые траектории .....	28
6.Незамкнутые траектории и рассеяние .....	31
7.Задача трех тел .....	33
<b>Глава 3. Движение твердого тела .....</b>	<b>37</b>
1.Введение .....	37
2.Природа и описание ориентации твердого тела .....	37
3.Матрицы вращения .....	40
4.Преобразования векторов и тензоров .....	42
5.Четность .....	43
6.Двумерное представление вращений .....	44
7.Вращающаяся система координат и сила Кориолиса .....	45
8.Вращающиеся тела .....	46

<b>Глава 4. Колебания</b>	50
1. Введение	50
2. Колебания молекул	50
3. Колебания при деформациях твердых тел	51
4. Нормальные колебания	52
5. Трехатомная молекула	53
6. Линейная цепочка $N$ атомов	55
7. Дисперсионные соотношения	58
8. Двухатомная линейная цепочка	59
9. Тепловые колебания твердых тел	60
10. Вращения молекул	61
11. Колебательная спектроскопия молекул	63
<b>Глава 5. Канонические преобразования</b>	66
1. Введение	66
2. Канонические преобразования	66
3. Гармонический осциллятор	67
4. Уравнение Гамильтона—Якоби	69
5. Случай переменных действие—угол	70
6. Скобки Пуассона	71
<b>Глава 6. Нелинейная динамика и хаос</b>	73
1. Введение	73
2. Теория возмущений	73
3. Гармонический осциллятор в фазовом пространстве	75
4. Траектории системы на $N$ -мерном торе	76
5. Устойчивость возмущенных траекторий и переход к хаосу	77
6. Логистическое уравнение или квадратичный итератор	78
7. Характеристики и постоянные хаоса	83
8. Хаос в различных системах	85
<b>Глава 7. Теория относительности</b>	92
1. Введение	92
2. Ньютонаовская механика	92
3. Постоянство скорости света	93
4. Преобразования Лоренца	93
5. Прошедшее и будущее	95
6. Лоренцево сокращение длины и замедление времени	99
7. Эффект Доплера	100
8. Второй закон Ньютона	100
9. Скалярные произведения и инварианты	101
10. Преобразования более общего вида	102
<b>Глава 8. Термодинамика</b>	105
1. Введение	105
2. Полные и неполные дифференциалы	105
3. Законы (начала) термодинамики	106
4. Тепловая машина и цикл Карно	108
5. Внутренняя энергия, энталпия и свободные энергии	110
6. Соотношения Максвелла	112
7. Правило фаз Гиббса	113

8. Фазовые переходы .....	113
9. Удельная теплоемкость идеального газа .....	115
10. Уравнение адиабаты идеального газа .....	116
11. Удельная теплоемкость твердых тел .....	117
12. Термоэлектрические и термомагнитные эффекты .....	118
13. Отрицательные температуры .....	123
14. Статистическая механика .....	124
<b>Глава 9. Статистическая механика и функции распределения .....</b>	<b>125</b>
1. Введение .....	125
2. Микроканонический ансамбль .....	126
3. Канонический ансамбль .....	127
4. Большой канонический ансамбль .....	128
5. Термодинамика .....	130
6. Парамагнетизм .....	131
7. Энтропия и адиабатическое размагничивание .....	132
8. Распределение Максвелла .....	134
9. Классическая и квантовая статистика .....	136
10. Функции распределения .....	137
11. Статистика фотонов .....	139
12. Статистика орто-пара состояний .....	141
<b>Глава 10. Постоянные электрические и магнитные поля .....</b>	<b>142</b>
1. Введение .....	142
2. Электрические и магнитные поля .....	142
3. Уравнения Максвелла .....	143
4. Потенциалы электромагнитного поля .....	144
5. Электрическая и магнитная постоянные .....	145
6. Границные условия на поверхности раздела сред .....	146
7. Источники электрического поля .....	147
8. Источники магнитного поля .....	148
9. Постоянное электрическое поле .....	150
10. Границные условия .....	151
11. Решение краевых задач .....	152
12. Тессеральные и сферические гармоники .....	153
13. Постоянное магнитное поле .....	154
14. Закон Фарадея .....	156
<b>Глава 11. Электромагнитные поля в сплошных средах и мультиполи .....</b>	<b>158</b>
1. Введение .....	158
2. Электрические мультиполи .....	158
3. Поле электрического диполя .....	161
4. Энергия и момент силы .....	162
5. Магнитные мультиполи .....	163
6. Магнитные моменты .....	164
7. Диэлектрическая и магнитная проницаемости .....	166
8. Эллипсоиды в электрических и магнитных полях .....	167
9. Мультипольные моменты ядер и атомов .....	172

<b>Глава 12. Релятивистская электродинамика</b> . . . . .	174
1. Введение . . . . .	174
2. Тензор электромагнитного поля . . . . .	174
3. Инварианты . . . . .	176
4. Тензор электромагнитного поля и потенциалы . . . . .	178
5. Калибровочные преобразования . . . . .	179
6. Движение заряда в электромагнитном поле . . . . .	180
7. Скрещенные поля . . . . .	181
8. Адиабатические инварианты . . . . .	182
<b>Глава 13. Волновые процессы</b> . . . . .	184
1. Введение . . . . .	184
2. Плоские волны . . . . .	184
3. Отражение и преломление волн . . . . .	186
4. Отражение и преломление при наклонном падении волны . . . . .	188
5. Поляризация . . . . .	189
6. Поглощение и дисперсия . . . . .	190
7. Продовящая среда . . . . .	193
8. Волноводы . . . . .	194
9. Модулированные волны . . . . .	195
10. Солитоны . . . . .	197
<b>Глава 14. Оптика</b> . . . . .	199
1. Введение . . . . .	199
2. Показатель преломления . . . . .	199
3. Линзы . . . . .	200
4. Зеркала . . . . .	202
5. Поляризация . . . . .	203
6. Интерференция и дифракция . . . . .	205
7. Интерференция . . . . .	207
8. Явления, происходящие на одной, двух и большом числе щелей . . . . .	207
<b>Глава 15. Процессы излучения</b> . . . . .	212
1. Введение . . . . .	212
2. Излучение распределенных зарядов и токов . . . . .	212
3. Зоны излучения . . . . .	213
4. Излучение электрического диполя . . . . .	214
5. Излучение равномерно движущегося заряда . . . . .	216
6. Излучение ускоренного заряда . . . . .	217
7. Излучение ускоренного заряда в нерелятивистской области .	218
8. Излучение ускоренного заряда в релятивистской области .	219
9. Черенковское излучение . . . . .	222
10. Переходное излучение . . . . .	224
<b>Глава 16. Прохождение заряженных частиц через вещество</b> . . . . .	225
1. Введение . . . . .	225
2. Кулоновское рассеяние . . . . .	225
3. Столкновения с ядрами . . . . .	229
4. Тормозное излучение . . . . .	230
5. Томсоновское рассеяние . . . . .	231

<b>Глава 17. Момент импульса</b> .....	233
1. Введение .....	233
2. Импульс и момент импульса .....	233
3. Операторы моментов .....	234
4. Орбитальный момент и спин .....	236
5. Спин-орбитальное взаимодействие .....	238
6. Волновые функции и коэффициенты Клебша—Гордана .....	239
7. Неприводимые тензоры .....	243
<b>Глава 18. Матричная формулировка квантовой механики</b> .....	244
1. Введение .....	244
2. Матрицы момента импульса .....	244
3. Сложение моментов импульса .....	246
4. Эффект Зеемана в водороде .....	247
5. Общая матрица гамильтониана .....	250
<b>Глава 19. Уравнение Шредингера</b> .....	252
1. Введение .....	252
2. Гамильтониан .....	252
3. Оператор Лапласа и радиальное уравнение .....	254
4. Трехмерная прямоугольная потенциальная яма .....	255
5. Бесконечно глубокая яма .....	256
6. Трехмерный гармонический осциллятор .....	257
<b>Глава 20. Одномерные квантовые системы</b> .....	262
1. Введение .....	262
2. Уравнение Шредингера .....	262
3. Отражение от потенциальной стенки .....	264
4. Прохождение частицы над потенциальной стенкой .....	266
5. Потенциальный барьер .....	268
6. Прямоугольная потенциальная яма .....	270
7. Потенциальная яма с бесконечно высокими стенками .....	274
<b>Глава 21. Строение атома</b> .....	276
1. Введение .....	276
2. Атом водорода .....	276
3. Спин-орбитальное взаимодействие .....	279
4. Атом гелия .....	281
5. Энергетические уровни и размеры атомов .....	284
6. Метод Хартри—Фока .....	290
<b>Глава 22. Теория возмущений</b> .....	291
1. Введение .....	291
2. Разложение в степенные ряды .....	291
3. Стационарные возмущения .....	292
4. Эффект Зеемана в атоме водорода .....	293
5. Теория возмущений в случае вырождения .....	296
6. Нестационарные возмущения .....	297
7. Вероятность перехода .....	299
8. Рассеяние .....	301

<b>Глава 23. Газы, жидкости и твердые тела</b>	302
1. Введение	302
2. Газы	302
3. Фазовые переходы	303
4. Жидкое состояние и флуктуации	306
5. Диффузия	308
6. Структура твердых тел	309
7. Плотная упаковка	312
8. Прямая и обратная решетки	314
9. Определение кристаллической структуры	315
10. Ячейка Вигнера–Зейтца	317
11. Фононы и другие частицы	319
12. Сверхпроводимость	321
<b>Глава 24. Проводимость твердых тел</b>	323
1. Введение	323
2. Электронная теория металлов	324
3. Электропроводность	326
4. Переменный ток	327
5. Удельное сопротивление	328
6. Теплопроводность	329
7. Поверхность Ферми	330
8. Зоны в двумерной решетке	336
9. Полупроводники	339
10. Эффект Холла	342
<b>Глава 25. Строение ядра</b>	345
1. Введение	345
2. Фундаментальные взаимодействия	345
3. Размеры ядер	347
4. Энергия связи	348
5. Модель оболочек	351
6. Радиоактивный распад	354
7. Спиральность и несохранение четности	357
8. Эффект Мессбауэра	358
9. Радиоуглеродное датирование и углеродный цикл	359
<b>Глава 26. Элементарные частицы</b>	361
1. Введение	361
2. Свойства фундаментальных взаимодействий	362
3. Свойства элементарных частиц	365
4. Трехкварковая модель	366
5. Законы сохранения в процессах с участием элементарных частиц	375
6. Лептоны	376
7. Цвет, очарование, красота и истина	377
<b>Глава 27. Математическая физика. Тензоры и матрицы</b>	381
1. Введение	381
2. Векторный анализ	381
3. Системы координат	383

---

4.Определители (детерминанты) . . . . .	387
5.Матрицы . . . . .	388
6.Матрицы Паули и спиноры . . . . .	391
7.Тензоры . . . . .	392
8.Бесконечные ряды . . . . .	395
9.Ряды Фурье . . . . .	395
10.Преобразование Фурье . . . . .	397
11.Интегральные преобразования и интегральные уравнения . . . . .	401
12.Функции комплексного переменного . . . . .	404
13.Интегрирование по контуру . . . . .	406
14.Теория групп . . . . .	408
15.Метод Монте-Карло . . . . .	414
<b>Глава 28. Математическая физика: дифференциальные уравнения и ортогональные функции . . . . .</b>	<b>416</b>
1.Введение . . . . .	416
2.Дифференциальные уравнения первого порядка . . . . .	416
3.Дифференциальные уравнения второго порядка . . . . .	417
4.Уравнения Лапласа и Гельмгольца . . . . .	425
5.Функции Бесселя . . . . .	428
6.Полиномы Лежандра . . . . .	434
7.Сферические гармоники . . . . .	436
8.Гамма-функция и родственные ей функции . . . . .	439
9.Дельта-функция . . . . .	443
10.Функции Грина . . . . .	444
<b>Литература . . . . .</b>	<b>446</b>
<b>Предметный указатель . . . . .</b>	<b>449</b>

*Справочное издание*

Чарлз П. Пул

## СПРАВОЧНОЕ РУКОВОДСТВО ПО ФИЗИКЕ

Фундаментальные концепции, основные уравнения и формулы

Зав. ред. В. В. Герасимовский

Ведущий редактор В. И. Самсонова

Художник Б. Л. Будинас

Технические редакторы О. Г. Лапко, Е. В. Денюкова

Корректор Е. Н. Клитина

Оригинал-макет подготовлен Н. Б. Андреевой

в пакете L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> с использованием семейства шрифтов

Computer Modern с кириллическим расширением LH

Лицензия ЛР № 010174 от 20.05.97 г.

Подписано к печати 18.01.2001 г. Формат 60 × 90/16. Печать офсетная.  
Объем 14,50 бум. л. Усл.-печ. л. 29,00. Уч.-изд. л. 26,08. Изд. № 2/9700.

Тираж 5000 экз. Заказ № 1168.

Издательство «Мир»

Министерство РФ по делам печати,  
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций  
107996, ГСП-6, Москва, 1-й Рижский пер., 2

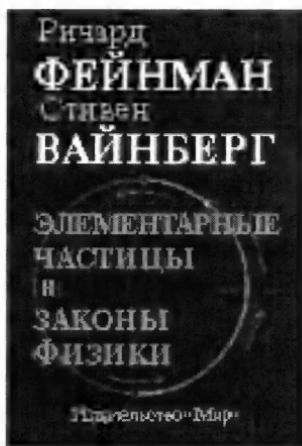
Диапозитивы изготовлены в издательстве «Мир»

Отпечатано в соответствии с качеством предоставленных диапозитивов  
в ППП «Типография «Наука» 121099, Москва, Шубинский пер., 6

# ЛУЧШИЕ КНИГИ МИРА – В ИЗДАТЕЛЬСТВЕ «МИР»



Имеется в продаже:



Фейнман Р., Вайнберг С.  
**ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ И ЗАКОНЫ ФИЗИКИ.**  
Пер. с англ. — 138 с., ил.

Теория относительности и квантовая механика являются самыми важными достижениями физики двадцатого столетия. Объединение этих теорий представляет собой сложную и до конца еще не решенную проблему, которая в увлекательной и

живой форме обсуждается в Дираковских лекциях, прочитанных выдающимися учеными, Нобелевскими лауреатами Ричардом Фейнманом и Стивеном Вайнбергом.

Р. Фейнман подробно рассказывает природу античастиц, а также связь спина со статистикой, показывает, что существование античастиц является прямым и неизбежным следствием объединения принципов релятивизма и квантовой теории.

С. Вайнберг рассматривает вопросы построения единой теории, объединяющей теорию гравитации Эйнштейна с квантовой теорией, а также проблемы дальнейшего развития науки о фундаментальной структуре материи.

Обе лекции представляют собой заметное явление на ниве популярного изложения фундаментальных проблем современной науки.

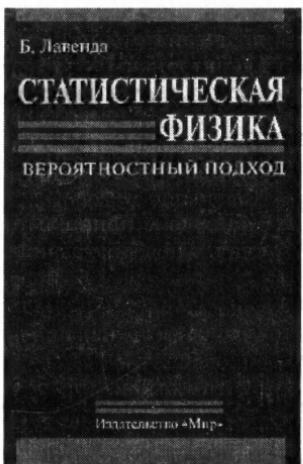
Книга рассчитана на широкий круг читателей, интересующихся проблемами современной физики.

Адрес: 107996, ГСП-6, Москва, 1-й Рижский пер., 2  
Контактные телефоны: (095)286-83-88, 286-82-33, 286-25-50  
Факс: (095)288-95-22 ◇ E-mail: victor@mir.msk.su ◇ <http://www.mir-pubs.dol.ru>



## ЛУЧШИЕ КНИГИ МИРА — В ИЗДАТЕЛЬСТВЕ «МИР»

Имеется в продаже:



*Лавенда Б. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД:* Пер. с англ. — 432 стр., ил.

Статистические методы находят в настоящее время самое широкое применение в физике и технологии. В последние два десятилетия благодаря их использованию был достигнут значительный прогресс в понимании и предсказании свойств маломерных систем, изучении высокотемпературной сверхпроводимости, теории фазовых переходов, физики плазмы, теории ранней Вселенной и других, порой весьма далеких друг от друга проблем.

В книге излагаются теоретические основы современных методов статистической физики, при этом большое внимание уделяется принципиальным вопросам обоснования статистической физики на основе вероятностного подхода.

Рассматриваются также темы: принцип Больцмана, излучение черного тела, термодинамическая вероятность, квантовая статистика, сопряженные распределения, статистическая эквивалентность, кинетическое основание принципа Гаусса.

Для студентов и преподавателей ВУЗов по специальностям химическая физика, статистическая физика и физическая химия, а также для научных работников.

Адрес: 107996, ГСП-6, Москва, 1-й Рижский пер., 2  
Контактные телефоны: (095) 286-83-88, 286-82-33, 286-25-50  
Факс: (095) 288-95-22 ◇ E-mail: victor@mir.msk.ru ◇ <http://www.mir-pubs.dol.ru>



Пул Ч.

## **Справочное руководство по физике**

Содержит сжатое систематическое изложение основных концепций и уравнений физики. Рассматриваются следующие разделы:

- классическая механика и нелинейная динамика,
- теория относительности,
- термодинамика и статистическая механика,
- электродинамика и оптика,
- квантовая механика и физика атома,
- физика конденсированных сред,
- физика атомного ядра и элементарных частиц.

Автору - профессору физики Университета Южной Каролины Чарлзу Пулу - удалось собрать в едином томе материал, обычно составляющий содержание многотомных изданий.

Справочник основан на курсе лекций для подготовки к квалификационным экзаменам по физике.

Материал книги отвечает объему знаний, необходимых изучающим физику студентам, аспирантам, преподавателям а также специалистам, соприкасающимся с проблемами физики в различных областях науки и техники.

ISBN 5-03-003330-0



9 785030 033303

Project Bonfire  
Pyrolysis & Gasification  
Technology

